Транспортные свойства материальных частиц

Неволин В.К.

Новые технологии всегда способствовали развитию науки. Нанотехнологии не являются исключением. Это научно-прикладное направление, выявляющее и использующее в интересах людей фундаментальные свойства материи в нанометровом масштабе. С развитием нанотехнологий меняются представления об окружающих объектах наномира. В статье предлагается посмотреть на движение материальных частиц в пространстве с несколько необычной стороны.

Объект с массой покоя отличной от нуля, размеры которого существенно меньше области, в которой он движется, назовем материальной частицей. Если в каждый момент времени частица занимает вполне определенное положение в пространстве и описывается классическими уравнениями движения, то в результате решения уравнений движения получаем хронологию событий во времени и пространстве. Как же на самом деле происходит движение частицы? Об этом задумывались еще древние мыслители, например, Зенон Элийский в пятом веке до н.э. Как пишут историки он утверждал: «Летящая стрела неподвижна, так как в каждые моменты времени она покоится, а поскольку она покоится в каждый момент времени, то она покоится всегда». Получается, что для совершения движения в каждый момент времени частица должна «дрожать» - иметь неопределенность значений координат и, следовательно, импульса. Закон сохранения энергии для такой свободной частицы можно записать в виде:

$$E = \mathbf{P}^2 / 2m + \Delta\varepsilon \qquad (1)$$

где $\boldsymbol{P}$- средне значение импульса, поскольку он должен флуктуировать – «дрожать» около некоторого среднего значения, m – масса частицы, $\Delta\varepsilon$- энергия «дрожания». Для классических частиц (частицы которые описываются классическими уравнениями движения) величина $\Delta\varepsilon$ - исчезающее мала, но принципиально не равна нулю и о ней обычно не говорят.

В квантовой механике для материальных частиц, совершающих инфинитное движение (движение неограниченное хотя бы в одном направлении), формула (1) выводится строго, и загадочная величина $\Delta\varepsilon$ является вполне конкретной величиной – энергией квантовых флуктуаций импульса частицы. Теперь понятно, что для описания движения макроскопических тел эта величина не имеет никакого значения, в то же время при описании квантовых движений эта величина может быть существенной. Например, электрон в атоме водорода локализован в области ядра и совершает чисто квантовое движение с дискретным значением энергии $\Delta\varepsilon_n$.

Здесь следует сделать отступление. Формула (1) и все последующие формулы далее по тексту были получены при описании движения квантовых частиц с помощью квантовых уравнений движения с физическими переменными, а не с помощью уравнения Шредингера [1,2]. Однако каждый раз полученные решения поверялись решениями уравнения Шредингера, в которых приходилось учитывать дополнительные условия. Система квантовых уравнений движения для частицы с массой m_0, которая движется в произвольном потенциальном поле, записывается в виде [1,2]:

$$m_0 \frac{\partial \rho}{\partial t} + div\rho\mathbf{P} = 0 \qquad (2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = -\nabla\left(\frac{P^2}{2m_0} + W + \frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m_0\rho^2} - \frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m_0\rho}\right) \qquad (3)$$

где $\rho(\mathbf{r},t)$- пространственно-временное распределение плотности вероятности частицы, $\mathbf{P}(\mathbf{r},t)$ - ее средний макроскопический импульс, $\mathrm{W}(\mathbf{r},t)$ – произвольная потенциальная энергия.

Для стационарного инфинитного движения свободной частицы из уравнений (2) и (3) получаем закон сохранения энергии в виде:

$$E = \frac{P^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m_0\rho^2} - \frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m_0\rho} = const \qquad (4)$$

Если обозначить квантовую составляющую энергии движения в виде:

$$\Delta\varepsilon = \frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m_0\rho^2} - \frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m_0\rho},$$

то из (4) получается формула (1). Результаты решения уравнений (2) и (3) для инфинитного движения квантовых частиц отличаются от аналогичных решений уравнения Шредингера, в особенности, когда квантовая составляющая энергии движения превосходит энергию поступательного движения $\Delta\varepsilon \geq P^2/2m_0$ [1,2].

«Дрожание» имеет место не только при поступательном движении квантовых частиц, но и при вращательном движении. Рассмотрим это явление на примере атома водорода. Можно ли узнать что-нибудь новое об атоме водорода? Кажется, в квантовой механике он изучен самым детальным образом, тем более что многие задачи о пространственной структуре и состояниях этого атома решаются аналитически. Однако можно показать, что плотность вероятности нахождение электрона, двигающегося вокруг ядра, в отличие от традиционных представлений в большей мере структурирована, а это должно приводить к уточнению известных эффектов [3].

Для стационарного пространственно ограниченного движения электрона в поле ядра с зарядом Z система уравнений (2) и (3) запишется в виде:

$$E = \frac{\hbar^2 (\nabla\rho)^2}{8m_0\rho^2} - \frac{\hbar^2 \Delta\rho}{4m_0\rho} - \frac{Ze^2}{r} = const \tag{5}$$

Решая это уравнение в сферической системе координат методом разделения переменных $\rho = \rho_r(r)\rho_\theta(\theta)\rho_\varphi(\varphi)$, получаем решение, отличающееся от решения аналогичной задачи с помощью уравнения Шредингера. Решение отличается только для составляющей $\rho_\varphi(\varphi)$, а именно:

$$\rho_\varphi(\varphi) = \cos^2 m\varphi \text{, где } m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots l$$

В решении уравнения Шредингера $\rho_\varphi(\varphi)$ является константой. Для согласия решений, полученных двумя методами, нужно положить в решении уравнения Шредингера для Ψ_φ вместо

$$\Psi_\varphi = e^{im\varphi} \qquad \Psi_\varphi = (e^{im\varphi} + e^{-im\varphi})/2,$$

поскольку для невозмущенного атома водорода нет предпочтительного направления для вращательных состояний. Иначе говоря, это есть «дрожание» электрона для вращательных состояний, приводящее к структурированию плотности вероятности. Структурирование плотности вероятности по углу φ приводит в возбужденных состояниях к различию квадрупольных моментов, вычисленных с помощью прежних волновых функций для атома водорода и новых выражений для плотности вероятности [3]. Разница в величинах квадрупольных моментов, например, при $m=1$ может проявиться при изучении анизотропии флуктуаций квадрупольного излучения атома водорода в соответствующих квантовых состояниях.

На заре создания квантовой механики великий французский физик Луи де Бройль написал не только выражение для волны, носящей его имя и описывающей движение квантовых частиц, но один из первых предложил в своей докторской диссертации научному сообществу формулу [4]:

$$E = m_0 c^2 = \hbar\omega \tag{6}$$

Смысл этой формулы заключается в том, что элементарная частица с массой покоя m_0 представляет собой «сгусток» энергии, который должен двигаться по законам квантовой механики. В силу формулы (6) квантовая частица должна «дрожать». А если это так, то для частицы должно существовать поле стоячих волн плотности вероятности. Луи де Бройлю удалось найти волновую электромагнитную аналогию этого явления для электрона [4, стр.203]. Известно шредингеровское «дрожание» дираковских электронов, связанное с колебаниями центра тяжести частицы и для проявления которого нужно привлечь волны с отрицательной энергией [4, стр.530].

Покажем, что решение квантовых уравнений движения в представлении плотности вероятности с энергией из формулы (6) позволяет, прежде всего, получить дискретный спектр значений спина у квантовых частиц с ненулевой массой покоя, а также представления о пространственной структуре плотности вероятности для квантовых частиц [5].

Для стационарного пространственно ограниченного свободного движения квантовой частицы система уравнений (2) и (3) запишется в виде:

$$E = \frac{\hbar^2 (\nabla\rho)^2}{8 m_0 \rho^2} - \frac{\hbar^2 \Delta\rho}{4 m_0 \rho} - = const \tag{7}$$

где $E = m_0 c^2$, $\rho = \rho(\mathbf{r})$ - плотность вероятности распределения частицы в пространстве. Введем линейный масштаб задачи $r_0 = \hbar / m_0 c$. Это комптоновская длина волны. Для электрона $r_0 = 3{,}5 \cdot 10^{-11} см$. Тогда получим:

$$\frac{8}{(r_0)^2} = \frac{(\nabla\rho)^2}{\rho^2} - \frac{2\Delta\rho}{\rho} \tag{8}$$

Расположим сферическую систему координат в центре вероятностного распределения частицы и будем решать задачу методом разделения переменных $\rho(r,\theta,\varphi)=\rho_r(r)\rho_\theta(\theta)\rho_\varphi(\varphi)$. Для составляющей $\rho_\varphi(\varphi)$ получим выражение

$$\rho_\varphi=\cos^2 s\cdot\varphi \qquad \text{где} \qquad s=0,\pm\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},...$$

Назовем дискретные числа *s*- спинами квантовых частиц и покажем, что спин определяет пространственную структуру распределения плотности вероятности. Решение для $\rho_\theta(\theta)$ имеет вид:

$$\rho_\theta(\theta)=(\sin\ \theta)^{2s}$$

Решение $\rho_r(r)$ для частиц со спином равным нулю имеет вид:

$$\rho_r=\frac{r_0^2\sin^2(\sqrt{2}\cdot r/r_0)}{r^2}$$

Это решение описывает осцилляции плотности вероятности по радиусу с максимум локализации в центре с характерным радиусом $2r_0$ и напоминает неустойчивое распределение во времени плотности вероятности волнового пакета для квантовых частиц в механике Шредингера, рис.1.

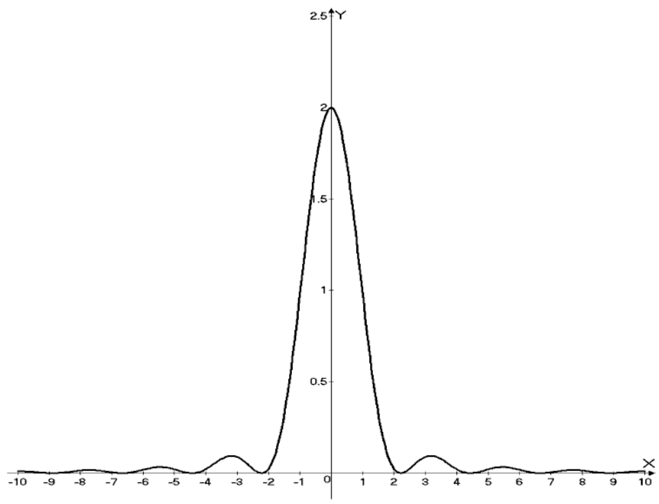

Рис.1. Распределение радиальной плотности вероятности для частиц с нулевым спином.

Для частиц со спином отличным от нуля получается более сложное решение в виде некоего тора с размытой внешней условной границей и внутренней областью запрещенной для движения и определяемой радиусом:

$$r < r_c = r_0\sqrt{\frac{s(s+1)}{2}}$$

Это некоторая область «темного пространства», движение в котором возможно только в состояниях с отрицательной энергией. Главное то, что радиальное решение для плотности вероятности дает ограничение на возможные значения спина:

$$s(s+1) < \left[\pi + \left(\frac{x_c\sqrt{2}}{\pi}\right)^s \sin(x_c\sqrt{2})\right]^2 \qquad \text{, где } x_c = \sqrt{\frac{s(s+1)}{2}} .$$

Спины всех известных стабильных элементарных частиц удовлетворяют этому неравенству.

Таким образом, свободные частицы с ненулевой массой покоя и отличным от нуля спином совершают вращательно-колебательные движения и в основном локализованы в области некого подобия тора. Если у такой квантовой частицы имеется заряд, то за счет вращательных состояний возникают замкнутые токи и соответствующий магнитный момент, связанный со спином частицы, например, у электрона.

Зная решение этой задачи в представлении плотности вероятности, можно получить аналогичные результаты и в представлении Шредингера. А именно, необходимо решать уравнение:

$$\Delta\Psi(r,\theta,\varphi) + \frac{2m^2c^2}{\hbar^2}\Psi = 0$$

Единственное отличие от стандартного решения этого уравнения методом разделения переменных $\Psi = \Psi_r(r)\Psi_\theta(\theta)\Psi_\varphi(\varphi)$ должно заключаться в том, что решение для Ψ_φ нужно записывать в полном виде:

$$\Psi_\varphi = C(e^{is\varphi} + e^{-is\varphi}) ,$$

поскольку нет предпочтительного направления для вращательных состояний. Другими словами – это выражение описывает «дрожание» для вращательных состояний элементарных квантовых частиц.

В свое время Луи де Бройлем в соответствии с формулой (6) не было предсказано наличие дискретных значений спина у квантовых частиц с ненулевой массой покоя, поскольку возобладал способ описания квантовых систем с помощью волновых функций, в продвижении которого он принял самое активное участие. Однако при описании движения квантовых частиц изначально с помощью плотности вероятности, имеющей физический смысл, такое решение является вполне доступным.

В целом можно заключить, что «дрожание» квантовых частиц в нерелятивистской квантовой механике является одним из способов их движения, а в классической механике разрешает парадоксы древних мыслителей.

Литература

1. Неволин В.К. Квантовая физика и нанотехнологии. М.: Техносфера. 2011. 127 с.
2. Неволин В.К. Квантовый транспорт в устройствах электроники. М.: Техносфера. 2012. 87с.
3. Неволин В.К. Все ли нам известно об атоме водорода? Журнал «Наноиндустрия». 2012. №3. С.20-22.
4. Де Бройль Луи. Избранные научные труды. Т.1. Становление квантовой механики. М.: Логос. 2010. 552 с
5. Неволин В.К. Пространственная локализация свободных квантовых частиц. Журнал «Наноматериалы и нанотехнологии». 2012. №3. С.39-44..