Российская Академия Естествознания
Издательский дом Академии Естествознания

В.К. Неволин

СУБАТОМНЫЕ СОСТОЯНИЯ ВОДОРОДА

Москва
2016

УДК 530.145 + 620.3
ББК 22.3
Н40

Неволин В.К.

Н40 Субатомные состояния водорода: сборник статей. – М.: Издательский дом Академии Естествознания, 2016. – 66 с.

ISBN 978-5-91327-411-3

DOI 10.17513/np.194

Субатомное состояние водорода – новое неизвестное ранее состояние водорода, предсказанное на основе многолетних теоретических исследований. Эти атомы отличаются высокой энергией связи и возможно вносят основой вклад в экспериментально доказанный холодный ядерный синтез.

Сборник статей, ранее опубликованных в различных изданиях, иллюстрирует оригинальный подход на основе решения целого ряда известных задач квантовой механики в представлении плотности вероятности и сравнения решений с результатами волнового представления, что позволяет устранить имеющиеся противоречия и получить ряд новых результатов, в том числе описание субатомных состояний.

Брошюра предназначена для аспирантов и молодых научных работников, изучивших ранее квантовую механику, и желающих непременно открыть новые эффекты.

ISBN 978-5-91327-411-3

© Неволин В.К., 2016
© ИД «Академия Естествознания»
© МОО «Академия Естествознания»

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ 4

1. ИСТОРИЯ ВОПРОСА 5
2. ПОЛНАЯ ЭНЕРГИЯ И ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЫ [2] 9
3. УРАВНЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ С ФИЗИЧЕСКИМИ ПЕРЕМЕННЫМИ 13
4. ДВИЖЕНИЕ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ С НУЛЕВОЙ МАССОЙ ПОКОЯ 16
5. «ДРОЖАНИЕ» КАК СПОСОБ ДВИЖЕНИЯ МАТЕРИАЛЬНЫХ ЧАСТИЦ В ПРОСТРАНСТВЕ 21
6. ВИХРЕВЫЕ (ТОРСИОННЫЕ) ПОЛЯ ПЛОТНОСТИ ВЕРОЯТНОСТИ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ 29
7. АТОМ ВОДОРОДА – ЧТО НОВОГО? 35
8. КВАДРУПОЛЬНЫЕ МОМЕНТЫ АТОМА ВОДОРОДА [1] 40
9. СПИН И ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ЛОКАЛИЗАЦИЯ СВОБОДНЫХ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ 44
10. ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ СУБАТОМНЫХ СОСТОЯНИЙ ВОДОРОДА 53
11. АТОМЫ ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ ГИПОТЕЗЫ ЛУИ ДЕ БРОЙЛЯ [8] 58

ЗАКЛЮЧЕНИЕ 64

ВВЕДЕНИЕ

Субатом водорода это квантовая система из протона и электрона, отличающиеся от традиционного водорода тем, что это более «компактная» система с необычно большой энергией связи ~500 кэВ. Такие «нейтральные» частицы практически не могут существовать свободно, приближаясь к другим частицам, в том числе, заряженным на достаточно близкие расстояния, они должны вступать с ними в ядерные реакции. Существование субатомов водорода (это могут быть и атомы дейтерия) является, возможно, одной из причин объясняющих экспериментально доказанный холодный ядерный синтез.

В сборнике статей, ранее опубликованных в различных изданиях, описан подход для решения квантовых задач на основе физических переменных в представлении плотности вероятности. Эти результаты сравнивались с волновыми решениями на основе уравнения Шредингера, что позволило устранить противоречия между разными подходами и получить ряд новых результатов, в частности, уточнить выражения для квадрупольных моментов атомов водорода, несколько по-иному представить спин квантовых частиц и последовательно, на наш взгляд, предсказать возможность существования субатомов водорода.

Подбор статей сделан так, что бы последовательно показать, что формула де Бройля, высказанная в виде гипотезы и связывающая собственную энергию квантовых частиц с постоянной Планка, является фундаментальным соотношением природы. Экспериментальное доказательство существования субатомов водорода явится подтверждением этого утверждения.

Это второе издание с измененным названием. Первое издание «Субатомы водорода», 2016 осуществлено в издательстве «LAMBERT» с возобновляемым тиражом по мере запросов. Учитывая высокие европейские цены на книги, предпринято второе издание в России для большей доступности брошюры для студентов и аспирантов. Издание отличается исправлениями и дополнительными материалами.

1. ИСТОРИЯ ВОПРОСА

В начале прошлого века были проделаны эксперименты, результаты которых не укладывались в понятия классической физики и которые привели по существу к рождению квантовой физики. В квантовой механике было введено понятие волновой функции, которая непосредственно не имеет физического смысла, но, тем не менее, позволяет описать эволюцию квантовых систем во времени, а квадрат модуля волновой функции имеет смысл пространственно-временного распределения плотности вероятности этой системы.

Наибольшее число вопросов вызывает изложение квантовой механики инфинитного движения частиц. С какой бы общностью не пытались получить уравнение Шредингера [1, 2], все сводится к одному (по Шредингеру). Взято классическое выражение для энергии E свободной частицы m, которая двигается с импульсом p

$$E = p^2/2m \tag{1.1}$$

и написано дифференциальное уравнение на языке плоских волн де Бройля для такого выражения.

$$\Psi(\vec{r},t) = Ae^{i\left(\frac{\vec{p}\vec{r}-Et}{\hbar}\right)}. \tag{1.2}$$

В результате получается уравнение Шредингера для сводной частицы, которое с помощью волновой функции Ψ описывает её эволюцию в пространстве и времени.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \tag{1.3}$$

где оператор Гамильтона для сводной частицы имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{(\hat{p})^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right),$$

где $\hbar$ – постоянная Планка.

Уравнение Шредингера является комплексным, ему соответствуют два действительных уравнения. Волновая функция также является комплексной и, как уже говорилось, не имеет физического смысла. Физический смысл имеет плотность вероятности, собственно она описывает эволюцию частицы в пространстве и времени.

$$\rho(\vec{r},t)=\Psi\cdot\Psi^{*}, \tag{1.4}$$

где Ψ^{*} – является комплексно сопряженной функцией.

И здесь возникает первое противоречие. Подставляя (1.2) в (1.4) получаем, что плотность вероятности свободной частицы постоянна во всем пространстве. Это необъяснимый факт. Получается что, плотность вероятности для свободной частицы, движущейся с импульсом $\vec{P}$, не зависит от координат и времени, то есть является постоянной во всем пространстве. Это противоречит экспериментальным данным. Попытка воспользоваться принципом суперпозиции и создать волновой пакет ни к чему не привела. Волновой пакет расплывается в пространстве и времени. В связи с этим один из современных способов решения квантовых задач инфинитного движения заключается в описании движения квантовых частиц с помощью огибающей волнового пакета на характерных размерах и временах много меньших чем параметры расплывания пакета.

Собственно с этого начинаются факты, лежащие в описании инфинитного движения в квантовой механике и не понятные до сих пор. На наш взгляд, одной из причин такого положения является то, что на заре зарождения квантовой механики отказались от описания квантовых систем с помощью физических величин. Это дорогая плата за введение нефизической функции Ψ. Дело в том, что при интерпретации квантовой механики в физических переменных без использования Ψ можно не только продвинуться в преодолении противоречий, имеющихся в квантовой механики, но и предсказать новые физические эффекты и экспериментально доказать их.

Как оказалось после публикации Э. Шредингером своего уравнения, на эту тему откликнулся Е. Маделунг и в 1926 году опубликовал уравнения движения квантовой частицы в физических

переменных, которые имели квазигидродинамический вид. Одно из двух уравнений оказалось нелинейным. Раскопал всю эту библиографию Д. Бом, американский физик, который в 50-х годах внес значительный вклад в развитие квазигидродинамического описания квантовых систем [3, 4]. С тех пор нелинейный метод описания движения квантовых частиц с помощью величин, имеющих физический смысл, использовался для решения ряда квантовых задач. Например, при численных расчетах рассеяния квантовых частиц оказалось более удобным использовать квазигидродинамическое описание [5]. В конечном счете, использование квазигидродинамического описания оправдано, если получены новые результаты, которые подтверждаются экспериментально или могут иметь экспериментальное подтверждение.

Возможно, одной из причин того, что не «прижилось» квазигидродинамическое описание, является то, что одно из уравнений является нелинейным, которое весьма трудно решать аналитически. Впрочем, в квантовой механике не много решенных аналитически задач даже с использованием линейного уравнения Шредингера.

Поиск не тривиальных решений для инфинитных одночастичных состояний привел нас к решениям уравнения Шредингера в квазигидродинамическом виде. Квантовые квазигидродинамические уравнения позволяют описывать последовательно инфинитные и неинфинитные состояния квантовых частиц. При необходимости полученные результаты можно удостоверить с помощью традиционных решений уравнений Шредингера. Обращение к квантовым квазгидродинамическим уравнениям с физическими величинами позволяют несколько иначе взглянуть на давно известные результаты для одночастичных инфинитных состояний.

Описание квантовых систем с помощью квазигидродинамических уравнений будем называть представлением плотности вероятности и, как показывает опыт, квантовые задачи нужно решать в двух представлениях: с помощью волновых функций и с помощью представления плотности вероятности. Такой подход, в конечном счете, позволил предсказать существования субатомов водорода.

Литература

1. Д.И. Блохинцев. Основы квантовой механики. М.: Изд. Наука 1976. 664 с.

2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Гиз. ФМЛ. 1963. 702 с.

3. Вопросы причинности в квантовой механике. Сб. переводов под ред. Я.П. Терлецкого и А.А. Гусева. М.: ИЛ 1955г. С.34.

4. Ghosh S.K., Deb B.M. Physics Reports (Review Section of Physics Letters). 92 № 1 (1982).

5. Б.В. Алексеев, А.И. Абакумов. Об одном подходе к решению уравнения Шредингера. Доклады Академии наук. Т. 262, С. 1100. 1982.

2. ПОЛНАЯ ЭНЕРГИЯ И ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЫ [2]

К сожалению, нередко в учебниках по квантовой механике выражением для полной энергии свободной частицы считается формула:

$$E = p^2/2m. \tag{2.1}$$

Однако эта формула описывает только энергию поступательного движения частицы. Частица совершает одновременно ещё квантовое движение и это её неотъемлемое свойство, в каких бы она состояниях не находилась – финитных или инфинитных. Таким образом, свободная частица одновременно участвует в двух движениях («корпускулярно-волновой дуализм») и каждому движению должна соответствовать своя энергия.

Пусть оператор Гамильтона частицы массы m, совершающей свободное движение имеет вид:

$$\hat{H} = \left(\hat{\vec{p}}\right)^2/2m. \tag{2.2}$$

В квантовой механике договорились и приняли, что реальной физической величине соответствует квантовомеханическое среднее от соответствующего оператора. Тогда энергия частицы равна:

$$E = \left\langle \hat{H} \right\rangle = \left\langle \hat{\vec{p}}^{\,2} \right\rangle / 2m = \left\langle \vec{p} \right\rangle^2 / 2m + \left\langle \left(\delta\vec{p}\right)^2 \right\rangle / 2m. \tag{2.3}$$

Здесь принято:

$$E = \left\langle \hat{H} \right\rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi d\mathbf{r} \quad \text{и} \quad \left\langle \left(\hat{\vec{p}} - \left\langle \vec{p} \right\rangle \right)^2 \right\rangle = \left\langle (\delta\vec{p})^2 \right\rangle.$$

Можно видеть, что квантовая частица одновременно участвует в двух движениях: совершая поступательное движение с кинетической энергией

$$E_k = \left\langle \vec{p} \right\rangle^2 / 2m$$

и чисто квантовое движение с энергией квантовой нелокальности движения, обусловленной флуктуациями импульса

$$\delta\varepsilon = \left\langle (\Delta\vec{p})^2 \right\rangle / 2m.$$

Таким образом,

$$E = E_k + \delta\varepsilon. \tag{2.4}$$

Какой вид должна иметь волновая функция свободной частицы с энергией (2.4)? Используем принцип суперпозиции квантовых состояний для частицы, участвующей одновременно в двух движениях, и запишем волновую функцию в виде:

$$\Psi(\vec{r},t) = \frac{\sqrt{\rho_0}}{2}\left(e^{\frac{i(\vec{p}_1\vec{r}-E_1t)}{\hbar}} + e^{\frac{i(\vec{p}_2\vec{r}-E_2t)}{\hbar}} \right). \tag{2.5}$$

Положим:

$$\langle \vec{p} \rangle = (\vec{p}_1 + \vec{p}_2)/2; \qquad \Delta\vec{p} = (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)/2;$$

$$E_1 = p_1^2/2m; \qquad E_2 = p_2^2/2m; \qquad E = (E_1 + E_2)/2.$$

Обозначим далее $\langle \mathbf{p} \rangle = \mathbf{p}$. Тогда плотность вероятности свободной частицы, совершающей инфинитное движение, будет иметь вид:

$$\rho(\vec{r},t) = \rho_0 \cos^2\left(\frac{\delta\vec{p}(\vec{r} - t\vec{p})/m}{\hbar} \right). \tag{2.6}$$

Здесь предполагается, что начальная фаза волны равна нулю. Тогда один из максимумов плотности вероятности совпадает с классическим местоположением частицы, и этот центр перемещается в пространстве с импульсом $\vec{p}$. Использование большего числа волновых функций для написания суперпозиции, описывающей движение свободной частицы, приводит к известной проблеме – расплыванию ρ в пространстве со временем для каждой частицы. Принимая обозначения для полной энергии частицы E и среднего

импульса $\boldsymbol{p}$ волновую функцию частицы из формулы (2.5) можно преобразовать к виду:

$$\Psi(\vec{r},t)=\sqrt{\rho_0}\cos\left(\frac{\delta\vec{p}\,(\vec{r}-t\vec{p})/m}{\hbar}\right)e^{\frac{i(\vec{p}\vec{r}-Et)}{\hbar}}. \qquad (2.7)$$

Формула (2.7) показывает, что амплитуда плоской волны модулируется гармонической функцией и её максимум распространяется в пространстве с классической скоростью $\mathbf{p}/m$. Период осцилляций амплитуды в пространстве подчиняется следующим соотношениям для любого момента времени:

$$\delta p_x\cdot\delta x=2\pi\hbar;\quad \delta p_y\cdot\delta y=2\pi\hbar;\quad \delta p_z\cdot\delta z=2\pi\hbar.$$

Не трудно убедиться, что подстановка волновой функции (2.7) в уравнение Шредингера для свободной частицы дает выражение для полной энергии частицы в виде формулы (2.3) или (2.4).

Далее покажем, что выражение для плотности вероятности свободной частицы (2.6) является аналитическим решением квантовых квазигидродинамических уравнений.

В общем случае волна плотности вероятности свободной частицы (2.6) совершает продольно-поперечные колебания с волновым вектором

$$\vec{k}=\delta\vec{p}/\hbar, \qquad (2.8)$$

частотой

$$\omega=(\delta\vec{p}/\hbar)(\vec{p}/m)=\vec{k}\vec{v} \qquad (2.9)$$

и линейным законом дисперсии, что существенно. С её помощью качественно можно объяснить известные экспериментальные результаты по интерференции частицы самой с собой при прохождении двух щелей [1]. Заметим, что в монографии [1] при интерпретации интерференционной картины на экране предлагается суперпозиция двух волновых функций (после прохождения щелей) для описания инфинитного движения отдельной квантовой частицы.

Закон сохранения энергии движения для свободных частиц (2.4) с помощью (2.6) можно записать в следующем виде:

$$E = E_k + (\hbar k)^2/2m \quad \text{или} \quad E = E_k + (\hbar\omega/2)(\hbar\omega/2E_k) + \hbar^2 k_\perp^2/2m, \qquad (2.10)$$

где $k_\perp$ – поперечна составляющая волнового вектора относительно направления движения. Можно видеть, что квантовая составляющая энергии свободного движения частицы имеет волновую природу и связана с энергией квантовых колебаний плотности вероятности. Заметим, что гармонические колебания плотности вероятности в соответствии с формулами (2.6) и (2.9) происходят на удвоенной частоте.

Если не учитывать поперечную составляющую флуктуаций импульса $k_\perp = 0$ и положить, что квантовая составляющая энергии движения равна кинетической энергии $E_k = \hbar\omega/2$, то получаем прежние постулаты квантовой механики для частиц с ненулевой массой.

$$E = \hbar\omega; \quad \vec{P} = \hbar\vec{k}.$$

Эти формулы в соответствии с (2.10) описывают возможный частный случай.

Литература

1. Физика квантовой информации. Под ред. Д. Боумейстера, А. Экерта, А. Цайлингера. (М.: Постмаркет. 2002) с. 18. (The Physics of Quantum Information edited by D. Bouwmeester, A. Ekert, A. Zeilinger. Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2000).

2. Неволин В.К. Об энергии движения свободных квантовых частиц в разреженных пучках. Журнал инженерная физика. 2009. № 5 С. 20.

3. УРАВНЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ С ФИЗИЧЕСКИМИ ПЕРЕМЕННЫМИ

Запишем уравнения движения квантовой механики в квазигидродинамическом виде. Как уже ранее было сказано, по-видимому, вначале их опубликовал Е. Маделунг в 1926 г. вслед за Э. Шредингером, а в 50-х годах Д. Бом [1, 2].

Воспользуемся стандартным уравнением Шрёдингера для движения частицы массой m без спина и магнитного поля в произвольном потенциальном поле:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= \hat{H}\Psi; \\ \rho &= \Psi\Psi^{*}, \end{aligned} \tag{3.1}$$

которое является комплексным и, вообще говоря, эквивалентно двум уравнениям в действительном пространстве. Одно из этих уравнений приводится во многих учебниках по квантовой механике. Это уравнение обычно называют законом сохранения плотности вероятности

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{1}{m}div\vec{J}\ =0, \tag{3.2}$$

где вектор плотности потока вероятности равен

$$\vec{J}\ /\ m=\frac{1}{2m}\left(\Psi^{*}\hat{\vec{P}}\Psi+\Psi\hat{\vec{P}}^{*}\Psi^{*}\right), \tag{3.3}$$

где $\vec{P}$ – оператор импульса. Для инфинитного движения в пространстве неограниченном хотя бы с одной стороны существует макроскопический импульс $\vec{P}$

$$\hat{\vec{P}}\Psi=\vec{P}\Psi.$$

Тогда уравнение (3.1) можно записать в виде:

$$m\frac{\partial\rho}{\partial t}+div\rho\vec{P}=0. \tag{3.4}$$

Уравнение движения (3.4) получается умножением уравнения (3.1) и его комплексно сопряженного вида соответственно на Ψ и Ψ^*, и вычитанием полученных уравнений. Следующее уравнение получается сложением названых выражений:

$$\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = -\nabla\left(\frac{P^2}{2m} + U + \frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m\rho^2} - \frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m\rho}\right). \tag{3.5}$$

Система уравнений (3.4), (3.5) с плотностью вероятности $\rho(x, y, z, t)$ и импульсом $\vec{P}$ является замкнутой и эквивалентной (3.1). Можно видеть, что это уравнение является квазигидродинамическим и нелинейным. Уравнение (3.5) записано несколько в другом виде, чем в [2, 3].

Если макроскопический импульс не существует, например, в области туннелирования, то систему уравнений (3.4), (3.5) необходимо записывать в других переменных. Она будет состоять из уравнения (3.2) и уравнения

$$\frac{\partial\left(\vec{J}/\rho\right)}{\partial t} = -\nabla\left(\frac{J^2}{2m\rho^2} + U + \frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m\rho^2} - \frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m\rho}\right). \tag{3.6}$$

Для движения квантовой системы из N невзаимодействующих частиц с макроскопическими импульсами и одинаковой массы имеем:

$$\frac{\partial \vec{P}_i}{\partial t} = -\nabla_i \sum_{n=1}^{N}\left(\frac{P_n^2}{2m} + U_n + \frac{\hbar^2(\nabla_n\rho)^2}{8m\rho^2} - \frac{\hbar^2\Delta_n\rho}{4m\rho}\right); \tag{3.7}$$

$$m\frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_{n=1}^{N}\nabla_n\left(\rho\vec{P}_n\right) = 0. \tag{3.8}$$

С помощью уравнений (3.7) и (3.8) можно показать, что плотность вероятности для системы невзаимодействующих между собой частиц, как и прежде, равна произведению плотностей вероятности входящих в систему частиц.

Какова же роль квазигидродинамических квантовых уравнений движения? На наш взгляд, эти уравнения являются поверочными для принципа суперпозиции волновых функций. Квазигидродинамические уравнения детализирует принцип суперпозиции, делает его предметным, не допускает неограниченного суммирования квантовых

состояний, например, как в случае волнового пакета. Для инфинитного движения квантовых частиц каждому виду энергии соответствует волновая функция.

Суперпозиция (сложение) волновых функций приводит не только к новому квантовому состоянию, но и приводит, как это можно видеть из смысла уравнений Шредингера для инфинитных состояний, к изменению энергии квантовой системы, чем обычно не задумываются.

Обратимся вновь к уравнению (3.5). В стационарном случае оно будет иметь вид:

$$\nabla\left(\frac{P^2}{2m}+U+\frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m\rho^2}-\frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m\rho}\right)=0 \tag{3.9}$$

или

$$E=\frac{P^2}{2m}+U+\frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m\rho^2}-\frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m\rho}=\text{const}, \tag{3.10}$$

где полная энергия квантовой частицы Е является аддитивной величиной, а квантовая составляющая энергии движения имеет вид:

$$\delta\varepsilon=\frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m\rho^2}-\frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m\rho}. \tag{3.11}$$

Эту величины Д. Бом называл квантовым потенциалом. Далее можно будет убедиться, что наряду с величиной δε квантовая частица согласно гипотезе де Бройля обладает ещё собственной энергией движения пропорциональной её массе.

Литература

1. Вопросы причинности в квантовой механике. Сб. переводов под ред. Я.П. Терлецкого и А.А. Гусева. М.: ИЛ 1955. С. 34.

2. Ghosh S.K., Deb B.M. Densities, Density-Functionals and Electron Fluids. Physics Reports (Review Section of Physics Letters). 92 № 1 (1982).

3. Б.В. Алексеев, А.И. Абакумов. Об одном подходе к решению уравнения Шредингера Доклады Академии наук. Т. 262, С. 1100. 1982.

4. ДВИЖЕНИЕ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ С НУЛЕВОЙ МАССОЙ ПОКОЯ

В свое время Луи де Бройль весьма был озадачен тем, что уравнение Шредингера «покоится» на законах сохранения движения для квантов света и, тем не менее, не описывает волновые свойства фотонов [1]. При квазигидродинамическом описании такое возможно.

При квазигидродинамическом описании [2, 3] уравнения инфинитного движения квантовой частицы массы m в произвольном внешнем поле $W(r, t)$ записываются в виде:

$$m\frac{\partial \varrho}{\partial t} + div\rho\vec{P} = 0; \tag{4.1}$$

$$\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = -\nabla\left(\frac{P^2}{2m} + W + \frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m\varrho^2} - \frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m\varrho}\right), \tag{4.2}$$

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

Поскольку первое уравнение приводится во многих учебниках по квантовой механике, а второе используется не часто, приведем краткую историю написания этой системы уравнений. Если ввести стандартные обозначения:

$$\rho(\vec{r},t) = \Psi\Psi^*; \tag{4.3}$$

$$\vec{P} = \frac{i\cdot\hbar}{2}\left(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi\right) \tag{4.4}$$

то, из уравнения Шредингера можно получить выписанную выше систему уравнений (4.1) и (4.2). Нелинейный метод описания движения квантовых частиц с помощью величин, имеющих физический смысл, использовался для численного решения квантовых задач.

Например, при численных расчетах рассеяния квантовых частиц оказалось более удобным использовать квазигидродинамическое представление [3]. Однако численные расчеты не могут дать представления о возможностях квазигидродинамического описания инфинитного движения квантовых частиц. Нам удалось найти ряд аналитических решений известных квантовых задач и понять, что описание инфинитного движения квантовых частиц с помощью волны плотности вероятности является менее противоречивым и более адекватным по сравнению с описанием с помощью волновой функции. И главное, квазигидродинамический подход позволяет предсказать ряд новых эффектов, которые по-новому объясняют известные прежние экспериментальные результаты и которые позволяют получить новые экспериментальные доказательства [5].

В исходной системе уравнений (4.1) и (4.2) введем макроскопическую скорость $\vec{v}$ из определения макроскопического импульса $\vec{P} = m\vec{v}$, тогда уравнение неразрывности в соответствии с формулой (4.1) можно записать в виде:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + div\, \rho \vec{v} = 0. \tag{4.5}$$

В этом случае уравнение неразрывности принимает стандартный вид и обычно называется дифференциальным законом сохранения плотности вероятности. Уравнение (4.2) при переходе от макроскопического импульса к макроскопической скорости запишется в виде:

$$m\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = -\nabla\left(\frac{mV^2}{2} + W(r,t) + \frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m\rho^2} - \frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m\varrho}\right). \tag{4.6}$$

Для свободных частиц, когда $W(r, t) = 0$ и $\vec{V} = \text{const}$ уравнение (4.6) имеет тривиальное решение $\rho = \text{const}$, которое соответствует волнам де Бройля и которое ранее использовалось для описания квантовой бесстакновительной плазмы [6]. Однако система уравнений (4.5) и (4.6) помимо тривиального решения имеет и другие решения, что увеличивает предсказательные возможности квазигидродинамического представления для движения квантовых частиц.

Умножим уравнение (4.6) на $2m$ и устремим $m \to 0$, получим

$$\nabla\left(\frac{\hbar^2 (\nabla\rho)^2}{4\varrho^2} - \frac{\hbar^2 \Delta\varrho}{2\varrho} \right) = 0. \tag{4.7}$$

Первое интегрирование этого уравнения дает:

$$\delta(\vec{P})^2 = \frac{\hbar^2 (\nabla\rho)^2}{4\varrho^2} - \frac{\hbar^2 \Delta\varrho}{2\varrho} = \text{const}. \tag{4.8}$$

Здесь принято обозначение константы интегрирования для движения безмассовых частиц в виде квадрата квантового импульса [7]. В качестве решения системы уравнений (4.6) и (4.8) можно воспользоваться готовым решением из [7] в виде:

$$\varrho(\vec{r},t) = \varrho_0 \cos^2\left(\frac{\delta\vec{p}(\vec{r} - t\vec{v})}{\hbar} \right). \tag{4.9}$$

Это решение описывает волну плотности вероятности, которая распространяется в пространстве с волновым вектором $\vec{k}$:

$$\delta\vec{p} = \hbar\vec{k}. \tag{4.10}$$

А закон дисперсии для частоты колебаний в этой волне запишется в виде:

$$\omega = \vec{k}\,\vec{v} = kv. \tag{4.11}$$

Поскольку не существует макроскопический импульс $\vec{P}(\vec{r}, t)$, который связан с массой частицы, то векторы $\vec{k}$ и $\vec{v}$ совпадают по направлению. Для энергии квантов этого поля имеем линейный закон дисперсии:

$$E = \hbar \cdot \omega = \hbar \cdot k \cdot v. \tag{4.12}$$

Здесь скорость безмассовых квантовых частиц не определена. Это могут формально быть, например, длинноволновые акустические фононы, или фотоны, распространяющиеся со скоростью света,

когда $v = c$. Здесь не требуется лоренцевская инвариантность исходных уравнений, поскольку масса покоя фотонов равна нулю.

Если частица движется со скоростью света $v = c$, то имеем:

$$\delta p = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k. \tag{4.13}$$

Это есть стандартное выражение для импульса фотона. Пользуясь формулами (4.10) и (4.11) выражение для плотности вероятности (4.9) можно переписать в виде:

$$\varrho\left(\vec{r},t\right) = \varrho_0 \cos^2\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right). \tag{4.14}$$

Плотность электромагнитной энергии в вакууме для плоских электромагнитных волн равна [8]

$$\rho_e = \frac{E_0^2}{4\pi}\cos^2\left(\vec{k}\,\vec{r} - \omega t\right). \tag{4.15}$$

где E_0 – амплитуда электрического поля. Можно видеть, что плотность вероятности, описывающая движение частиц с нулевой массой, согласуется с плотностью электромагнитной энергии с точностью до нормировки. Тогда плотность потока вероятности

$$\vec{S} = \vec{v}\varrho\left(r,t\right)$$

согласуется с точностью до коэффициента с плотностью потока электромагнитной энергии (вектор Умова – Пойтинга).

Полученные результаты ещё раз убеждают, что квантовые квазигидродинамические уравнения или представление плотности вероятности, на наш взгляд, более полно описывают волновую природу движения квантовых частиц.

Эта статья была написана к 120-летию со дня рождения Луи де Бройля (15.08.1892), к которому автор на протяжении своей жизни питает все возрастающий пиетет, и опубликована в [7]. С течением времени содержание статьи по необходимости изменилось. Здесь изложен её новый вариант.

Литература

1. Де Бройль Луи. Избранные научные труды. Т.1. Становление квантовой механики. М.: Логос. 2010. 552 с.

2. Ghosh S.K., Deb B.M. Densities, Density-Functionals and Electron Fluids // Physics Reports (Review Section of Physics Letters). – 1982. V. 92, № 1. – P. 1-44.

3. *Алексеев Б.В., Абакумов А.И.* Об одном подходе к решению уравнения Шредингера // *Доклады Академии наук* – 1982. Т.262. – С. 1100-1102.

4. Вопросы причинности в квантовой механике. Сб. переводов / Под ред. Я.П. Терлецкого и А.А. Гусева. – М.: ИЛ 1955. – С. 34.

5. Чаплыгин Ю.А., Неволин В.К., Петухов В.А. Эффект охлаждения анода при автоэлектронной эмиссии с катода. Доклады академии наук. 2011. Т.436. № 2. С. 1-3.

6. Кузелев М.В., Рухадзе А.А. О квантовом описании линейных кинетических свойств бесстолкновительной плазмы. УФН. 1999. Т. 169. № 6. С. 687-689.

7. Неволин В.К. Квантовая физика и нанотехнологии // М.: Техносфера. – 2013. – 127 с. Nevolin V.K. Quantum Physics and Nanotechnology. http:/arxiv.org/abs/1106.0973v1.

8. Неволин В.К. Квантовый транспорт в устройствах электроники // М.: Техносфера. – 2012. – 89 с.

9. Власов А.А. Макроскопическая электродинамика. М.: ГизТТЛ. 1955. С. 48.

5. «ДРОЖАНИЕ» КАК СПОСОБ ДВИЖЕНИЯ МАТЕРИАЛЬНЫХ ЧАСТИЦ В ПРОСТРАНСТВЕ

С позиций предыдущих разделов посмотрим на процесс поступательного движения в более общем виде.

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:

$$E = P^2/2m + \Delta\varepsilon, \tag{5.1}$$

где $\vec{P}$ – 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 (5.1) 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 (5.1) 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]:

$$m_0 \frac{\partial \rho}{\partial t} + div \rho \vec{P} = 0; \tag{5.2}$$

$$\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = -\nabla \left(\frac{P^2}{2m_0} + W + \frac{\hbar^2 (\nabla \rho)^2}{8m_0 \rho^2} - \frac{\hbar^2 \Delta \rho}{4m_0 \rho} \right), \tag{5.3}$$

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

Для стационарного инфинитного движения свободной частицы из уравнений (5.2) и (5.3) получаем закон сохранения энергии в виде:

$$E = \frac{P^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 (\nabla \rho)^2}{8m_0 \rho^2} - \frac{\hbar^2 \Delta \rho}{4m_0 \rho} = \text{const}. \tag{5.4}$$

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 (5.4) получается формула (5.1). Результаты решения уравнений (5.2) и (5.3) 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 (5.2) и (5.3) запишется в виде:

$$E = \frac{\hbar^2 (\nabla\rho)^2}{8m_0\rho^2} - \frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m_0\rho} - \frac{Ze^2}{r} = \text{const}. \qquad (5.5)$$

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:

$$\rho_\varphi(\varphi) = \cos^2 m\varphi,$$

где $m = 0, \pm1, \pm2, ..., l$.

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

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

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]:

$$E = m_0 c^2 = \hbar\omega. \tag{5.6}$$

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 (5.6) 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, с. 203]. Известно шредингеровское «дрожание» дираковских электронов, связанное с колебаниями центра тяжести частицы и для проявления которого нужно привлечь волны с отрицательной энергией [4, с. 530].

Покажем, что решение квантовых уравнений движения в представлении плотности вероятности с энергией из формулы (5.6) 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 (5.2) и (5.3) запишется в виде:

$$E = \frac{\hbar^2 (\nabla\rho)^2}{8m_0\rho^2} - \frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m_0\rho} - = \text{const}, \tag{5.7}$$

где $E = m_0c^2$; $\rho = \rho(\mathbf{r})$ – плотность вероятности распределения частицы в пространстве. Введем линейный масштаб задачи $r_0 = \hbar / m_0 c$. Это комптоновская длина волны. Для электрона $r_0 = 3{,}5\cdot10^{-11}$ см. Тогда получим:

$$\frac{8}{(r_0)^2} = \frac{(\nabla\rho)^2}{\rho^2} - \frac{2\Delta\rho}{\rho}. \tag{5.8}$$

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

$$\rho_\varphi = \cos^2 s\cdot\varphi,$$

где $s = 0, \pm\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$

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:

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

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. 5.1).

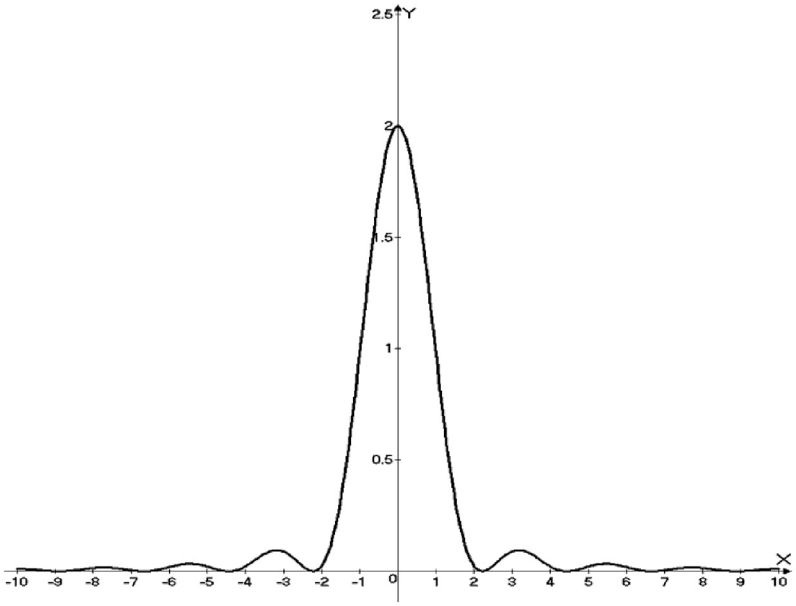

Рис. 5.1. Распределение радиальной плотности вероятности для частиц с нулевым спином

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:

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

Главное то, что радиальное решение для плотности вероятности дает ограничение на возможные значения спина:

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

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.

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:

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

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 (5.6) 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. 87 с.

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. www.nanotube.ru.

6. ВИХРЕВЫЕ (ТОРСИОННЫЕ) ПОЛЯ ПЛОТНОСТИ ВЕРОЯТНОСТИ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ

Наша задача – показать, что при вращательном движении квантовой частицы возможно существование и распространение вихревых (торсионных) волн плотности вероятности. Это можно доказать, решая нерелятивистское уравнение Шредингера в представлении плотности вероятности.

Обычно используется гидродинамическое представление уравнения Шредингера в виде [1–4]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div \rho \mathbf{v} = 0; \tag{6.1}$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} = -\frac{1}{m}\nabla\left[U^* + \frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m\rho^2} - \frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m\rho}\right], \tag{6.2}$$

где $\vec{v}$ – макроскопическая скорость частицы; $\rho(\vec{r},t)$ – плотность вероятности; m – масса частицы; $\hbar$ – постоянная Планка; U^* – потенциальная энергия, в которую по необходимости включают электромагнитные составляющие. Возможен учет и спиновых взаимодействий [5]. Эти уравнения неоднократно получались, начиная с Е. Маделунга и Д. Бома [1], путем представления волновых функций в квазиклассическом виде.

Уравнение для плотности вероятности из уравнения Шредингера можно получить и другим путем, если положить [6]:

$$\rho(\vec{r},t) = \Psi \cdot \Psi^*;$$

$$\rho\mathbf{v} = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi).$$

Тогда имеем, как и прежде, закон сохранения плотности вероятности (6.1) и уравнение движения в виде:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\frac{1}{m}\nabla\left[\frac{m\mathbf{v}^2}{2} + U^* + \frac{\hbar^2(\nabla\rho)^2}{8m\rho^2} - \frac{\hbar^2\Delta\rho}{4m\rho}\right] \tag{6.3}$$

Это уравнение отличается от уравнения (6.20). Если положить, что всегда имеет место безвихревое движение поля плотности вероятности, т.е.

$$\mathrm{rot}\mathbf{v} = 0,$$

то из уравнения (6.3) получается уравнение (6.2).

Таким образом, в гидродинамическом представлении с помощью уравнений (6.1) и вида (6.2) отсутствует возможность описания вихревых движений поля плотности вероятности квантовых частиц. Систему уравнений (6.1), (6.3) будем называть в отличие от гидродинамического представления представлением плотности вероятности (ранее мы называли его квазигидродинамическим представлением [6]).

Пусть квантовая частица совершает вращательное движение с угловой скоростью ω и радиусом R. Используем цилиндрическую систему координат, тогда орбитальная составляющая скорости $v_\varphi = \omega R$ и пусть частица двигается вдоль оси z с макроскопической скоростью v_z.

Тогда уравнение (6.1) запишется в виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{v_\varphi}{r}\frac{\partial \rho}{\partial \varphi} + v_z \frac{\partial \rho}{\partial z} = 0. \tag{6.4}$$

Решение этого уравнения представим таким образом:

$$\rho = \rho(\alpha); \quad \alpha = \left(v_\varphi k_\varphi + v_z k_z\right) t - k_\varphi r\varphi - k_z z. \tag{6.5}$$

Первый интеграл уравнения (6.3), учитывая постоянство скоростей v_φ и v_z, запишется в виде:

$$E = \frac{m}{2}\left(v_\varphi^2 + v_z^2\right) + \frac{\hbar^2 (\nabla\rho)^2}{8\rho^2 m} - \frac{\hbar^2 \Delta\rho}{4m\rho}. \tag{6.6}$$

Обозначим:

$$E - \frac{m}{2}\left(v_\varphi^2 + v_z^2\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_\varphi^2 + k_z^2\right). \tag{6.7}$$

Это можно сделать в силу того, что полная энергия квантовой частицы состоит из макроскопической и квантовой составляющей энергий [6]. Аддитивность составляющих полной энергии можно видеть и в правой части уравнений (6.3) и (6.6).

Уравнения (6.6) с учетом (6.7) и (6.5) будем иметь вид:

$$4\left(k_z^2+k_\varphi^2\right)=\left(k_z^2+k_\varphi^2+\varphi^2k_\varphi^2\right)\left[\frac{1}{\rho^2}\left(\frac{d\rho}{d\alpha}\right)^2-\frac{2}{\rho}\frac{d^2\rho}{d\alpha^2}\right]+\frac{\varphi k_\varphi}{r}\frac{2}{\rho}\frac{d\rho}{d\alpha}. \quad (6.8)$$

Нам необходимо найти волновое решение этого уравнения. Будем решать его методом последовательных приближений. Положим, что $\varphi << 1$ во всех коэффициентах, входящих в уравнение. Тогда получится уравнение:

$$4=\frac{1}{\rho^2}\left(\frac{d\rho}{d\alpha}\right)^2-\frac{2}{\rho}\frac{d^2\rho}{d\alpha^2}. \quad (6.9)$$

Решение этого уравнения найдено в [6] и имеет вид:

$$\rho=\rho_0\cos^2\alpha. \quad (6.10)$$

Это решение справедливо при любом значении α, в том числе и φ. Подставляя решение (6.10) в (6.8), получаем алгебраическое трансцендентное уравнение:

$$k_\varphi r\varphi=\mathrm{tg}\alpha=\mathrm{tg}\left[(v_\varphi k_\varphi+v_z k_z)t-\varphi k_\varphi r-zk_z\right]. \quad (6.11)$$

Формулы (6.10) и (6.11) описывают решения дифференциальных уравнений (6.4) и (6.8).

Перепишем решение (6.10) в другом виде:

$$\rho=\rho_0\cos^2\left(\omega t-\varphi k_\varphi r-k_z z\right). \quad (6.12)$$

Здесь ω – частота осцилляций волны плотности вероятности. Имеем линейный закон дисперсии:

$$\omega=v_\varphi k_\varphi+v_z k_z=\mathbf{vk}. \quad (6.13)$$

Вектор макроскопической скорости и волновой вектор не совпадают по направлению. Частота осцилляций волны является суммой осцилляций орбитального и поступательного движений. Решение (6.12) должно удовлетворять условию периодичности в любой момент времени и в любой точке z. Тогда

$$k_\varphi r_n=n,\quad n=1,2,3,\ldots \quad (6.14)$$

Орбитальный радиус поля плотности вероятности квантуется с равноудаленными расстояниями между окружностями:

$$r_n = \frac{n}{k_\varphi}; \qquad \delta r_n = \delta r_{n+1} - \delta r_n = \frac{1}{k_\varphi}. \tag{6.15}$$

С учетом (6.15) уравнение (6.11) запишется в виде:

$$n\varphi = \mathrm{tg}\alpha = \mathrm{tg}\left[\omega t - \varphi n - z k_z\right]. \tag{6.16}$$

Уравнение (6.16) обеспечивает синхронизацию угловой переменной с текущим временем в каждой точке на оси z. Найдем из уравнения (6.16) угловую скорость вращения поля плотности вероятности φ.

$$\omega_n = \frac{d\varphi}{dt} = \frac{\omega}{n\left(1+\cos^2\left(\omega t - \varphi n - z k_z\right)\right)} = \frac{\omega\rho_0}{n(\rho_0+\rho)}. \tag{6.17}$$

Орбитальная скорость вращения поля плотности вероятности равна:

$$v = \omega_n r_n = \frac{\omega\rho_0}{k_\varphi(\rho_0+\rho)}. \tag{6.18}$$

Можно видеть, что орбитальная скорость вращения поля вероятности в любой точке осциллирует в пределах от ω/k_φ до $0{,}5\omega/k_\varphi$.

Квантовое уравнение в виде (6.8) не зависит от массы частицы. Стало быть, это уравнение может описывать и движение безмассовых квантовых частиц, имеющих линейный закон дисперсии, в частности, длинноволновых фононов, фотонов и др. частиц. Благо, что в нерелятивистких уравнениях не имеют значения величины скорости для безмассовых частиц. В частности, в [6] было показано, что плотность вероятности и плотность потока вероятности с точностью до обозначений описывают плотность электромагнитной энергии для плоских электромагнитных волн в вакууме и вектор Умова – Пойтинга. В этом можно убедиться, используя формулы (6.12) и (6.13). Нужно положить v_φ и φ равными нулю и $v_z = c$, где c – скорость света. Для квантовомеханического описания движения безмассовых частиц (или частиц с исчезающее малой массой покоя) используются квантовый импульс и макроскопическая скорость. Однако континуум таких невзаимодействующих частиц, например, фотонов, описывает

различные электромагнитные волны в зависимости от величины волнового вектора или длины волны.

Использование скорости света для безмассовыз частиц в нерелятивисткой квантовой механике не приводит к противоречиям. Скорость света присутствует и в классических уравнениях Максвелла, определяя скорость распространения электромагнитных волн в вакууме. Можно предположить, что уравнение (6.8) может описывать квантовые свойства пучков света, в частности, аксиконов [7, 8], поскольку излучение в виде концентрических окружностей (6.15) во фронтальной плоскости напоминает обыкновенные аксиконы.

Для вихревого движения плотности поля вероятности частиц с массой покоя отличной от нуля необходимо выполнение условий:

$$v_\varphi,\ v_z << c,$$

где c – скорость света. Составляющие волнового вектора можно определять следующим образом:

$$k_\varphi = \frac{\sqrt{2m\delta\varepsilon_\varphi}}{\hbar};\qquad k_z = \frac{\sqrt{2m\delta\varepsilon_z}}{\hbar}, \tag{6.19}$$

где $\delta\varepsilon_\varphi$, $\delta\varepsilon_z$ – квантовые составляющие энергии орбитального и поступательного движения. Эти энергии отличаются от полных энергий согласно [6] и могут быть измерены отдельным способом [9]. Для оценок воспользуемся тем обстоятельством, что в традиционной квантовой механике полная энергия свободных квантовых частиц отождествляется с её квантовой величиной, что завышает значения волновых векторов. Положим:

$$k_{\varphi 0} = \frac{mv_\varphi}{\hbar} > k_\varphi;\qquad k_{z0} = \frac{mv_z}{\hbar} > k_z. \tag{6.20}$$

Например, если иметь дело с «холодными» нейтрино, масса покоя которых оценивается как 10^{-33} г [10], то величина $k_{\varphi 0} = 2\pi/\lambda_{\varphi 0}$, где $\lambda_{\varphi 0}$ – длина волны, при скоростях частиц $v_\varphi \sim 10^9$ см/с, $\lambda_\varphi > 6\cdot 10^{-3}$ см. Эта оценка показывает, что континуум невзаимодействующих «холодных» нейтрино может создавать, в том числе, макроскопические вихревые (торсионные) поля плотности вероятности.

Система квантовых уравнений движения с физическими переменными (6.1), (6.3), на наш взгляд, более адекватно отражает исходное уравнение Шредингера, чем система уравнений (6.1), (6.2), поскольку позволяет описывать вихревые поля плотности вероятности квантовых частиц. В нерелятивистском приближении для частиц с линейным законом дисперсии таких как: низкочастотные фононы, фотоны, «холодные» нейтрино возможны вихревые (торсионные) поля плотности вероятности. Существование вихревых полей оптических фотонов в виде аксиконов это реальность [7, 8].

Литература

1. Ghosh S.K., Deb B.M. Densities, Density-Functional and Electron Fluids // Physics Reports (Review Section of Physics Letters). – 1982. V. 92, № 1. – P. 1-44.

2. Алексеев Б.В., Абакумов А.И. Об одном подходе к решению уравнения Шредингера // Доклады Академии наук – 1982. Т. 262. – С. 1100-1102.

3. Кузелев М.В., Рухадзе А.А. О квантовом описании линейных кинетических свойств бесстолкновительной плазмы. УФН, 1999,т.169, № 6. С. 687-689.

4. Кузелев М.В.. Рухадзе А.А. Нерелятивисткая квантовая теория вынужденных черенковского излучения и комптоновского рассеяния в плазме. ФНТ, 2011, Т. 37, № 9/10 С. 1-7.

5. Микаэлян М.А. Гидродинамическая формулировка уравнений Паули. Прикладная физика. 2003. № 3. С. 5-9.

6. Неволин В.К. Квантовый транспорт в устройствах электроники. – М., Техносфера. – 2012. – 87 с.

7. Волостников В.Г. Спиральные пучки света. http:/www.fian.smr.ru/beam1.htm.

8. Скиданов Р.В., Ганчевская С.В. Формирование пучков Бесселя вихревыми аксиконами. Компьютерная оптика. 2014. Т. 38. № 3. С. 463-468.

9. Неволин В.К. Патент РФ. Способ измерения энергии квантовой нелокальности частиц, совершающих инфинитное движение. № 2444711 с приоритетом от 30.01.2009 г. Бюл.№ 7, 2012.

10. Лобашов В.М. Измерение массы нейтрино в бета-распаде трития. Вестник РАН. 2003. № 73(1). С. 14-27.

7. АТОМ ВОДОРОДА – ЧТО НОВОГО?

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 структурирована, а это должно приводить к уточнению известных эффектов и, возможно, к предсказанию новых. Для доказательства такого утверждения целесообразно решить задачу об атоме водорода в представлении плотности вероятности, непосредственно описывающую ее распределение во всех возможных квантовых состояниях рассматриваемого атома.

Уравнения для непрерывного движения квантовой частицы массы m_0 в произвольном внешнем поле ($W(\vec{r},t)$ в представлении плотности вероятности имеют вид [1–3]:

$$m_0 \frac{\partial \rho}{\partial t} + div \rho \vec{P} = 0; \tag{7.1}$$

$$\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = -\nabla \left(\frac{P^2}{2m_0} + W + \frac{\hbar^2 (\nabla \rho)^2}{8m_0 \rho^2} - \frac{\hbar^2 \Delta \rho}{4m_0 \rho} \right), \tag{7.2}$$

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

Для атома водорода в традиционной квантовой механике вычислен спектр энергий и найдены волновые функции. Для стационарного пространственно ограниченного движения электрона в поле ядра с зарядом Z система уравнений (7.1) и (7.2) запишется в виде:

$$E = \frac{\hbar^2 (\nabla \rho)^2}{8m_0 \rho^2} - \frac{\hbar^2 \Delta \rho}{4m_0 \rho} - \frac{Ze^2}{r} = \text{const}. \tag{7.3}$$

Волновые функции для атома водорода найдены, например, в [4]. Их можно записать в виде:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=\psi_{nlm}(r,\theta)e^{im\varphi}. \tag{7.4}$$

Здесь *n, l, m* – квантовые числа. Поскольку $\psi_{nlm}(r, \theta)$ – функция вещественная, то выражение для плотности вероятности имеет вид:

$$\rho_{nlm}=\psi^2_{nlm}(r,\theta). \tag{7.5}$$

Квантовая величина ρ_{nlm} показывает наличие осевой симметрии атома. Подставляя (7.5) в уравнение движения (7.3) и проведя все необходимые дифференцирования и сокращения подобных членов, получим стандартное уравнение Шредингера для электрона в кулоновском поле:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi_{nlm}-\frac{Ze^2}{r}\psi_{nlm}=E\psi_{nlm}. \tag{7.6}$$

Решение его позволяет получить энергетический спектр электрона в атоме и угловое распределение плотности вероятности. В общем виде уравнение имеет вид:

$$\hat{H}\psi=E\psi,$$

где оператор Гамильтона равен:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta-\frac{Ze^2}{r}. \tag{7.7}$$

Для отыскания собственных значений энергии к аналогичному виду можно привести уравнение (7.3):

$$\hat{H}(\rho)\rho=E\rho, \tag{7.8}$$

где нелинейный оператор Гамильтона равен:

$$\hat{H}(\rho)=-\frac{\hbar^2}{4m_0}\Delta+\frac{\hbar^2\nabla\rho\nabla}{8m_0\rho}-\frac{Ze^2}{r}. \tag{7.9}$$

Сравнивая (7.7) и (7.9) можно увидеть, что для аналитических решений задач о пространственно ограниченном движении квантовых частиц предпочтительнее линейный оператор (7.7).

Однако решение уравнения (7.8) с оператором (7.9) позволяет получить новые представления о движении электрона в атоме водорода. Рассматривая (7.4) и (7.5) можно видеть, что фаза волновой функции с магнитным квантовым числом исчезает при описании пространственно ограниченного движения с помощью плотности вероятности (7.5) и, как кажется, из решения должно исчезнуть само магнитное число. Это не так. Решая систему уравнений (7.8) и (7.9) методом разделения переменных, как это делается для уравнения (7.6) и, предположив $\rho(r, \theta, \varphi) = \rho_r(r)\rho_\theta(\theta)\rho_\varphi(\varphi)$, удается получить связанные между собой две константы разделения и следующие уравнения:

$$\frac{1}{\rho_\varphi^2}\left(\frac{d\rho_\varphi}{d\varphi}\right)^2 - \frac{2}{\rho_\varphi}\frac{d^2\rho_\varphi}{d\varphi^2} = \beta^2 = \text{const}; \qquad (7.10)$$

$$\frac{\beta^2}{\sin^2\theta} + \frac{1}{\rho_\theta^2}\left(\frac{d\rho_\theta}{d\theta}\right)^2 - \frac{2}{\rho_\theta \sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\rho_\theta}{d\theta}\right) = \lambda^2 = \text{const}. \qquad (7.11)$$

Заменим переменные в уравнении (7.11):

$$\rho_\theta = \gamma^2(\theta) \text{ и } \xi = \cos\theta,$$

и сведем это уравнение к известному уравнению, решенному для атома водорода с угловой переменной θ. Решение такого уравнения можно представить в виде полинома Лежандра [4]. Для нас важно, что константы разделения в этом уравнении квантуются:

$$\lambda^2 = 4l(l+1),$$

где $\lambda = 0, 1, 2, 3, \ldots$ и $\beta^2 = 4m^2$; $m = \beta/2 = 0, \pm1, 2 \ldots \pm l$, (7.12)

где l называю обычно орбитальным квантовым числом; m – магнитным квантовым числом.

Уравнение (7.10) решаем подстановкой $\frac{1}{\rho_\varphi}\frac{d\rho_\varphi}{d\varphi} = u(\varphi)$. Тогда $\rho_\varphi = \cos^2\frac{\beta\varphi}{2}$. Чтобы ρ_φ была однозначной функцией для константы β,

должны выполняться соотношения $\beta = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots$ Однако не все значения β удовлетворяют соотношениям (7.12), а только ноль и четные значения. Окончательно имеем

$$\rho_{\varphi} = \cos^2 m\varphi.$$

Из полученных решений следует, что в атоме водорода могут существовать: симметрия с $m = 0$ и оси симметрии первого, второго, третьего и последующего порядков. Это есть структурированное распределение плотности вероятности по углу φ с сохранением известных значений магнитных чисел, отличающееся от традиционных решений (7.4) и (7.5). Оно показывает, что для возбужденных атомов наряду с существованием орбитальных токов должны иметь место структурирование электронной плотности вероятности при движении по углу φ (рис. 7.1): для $m = \pm1$ в виде «двухлистника», для $m = \pm2$ «четырехлистника» и т.д.

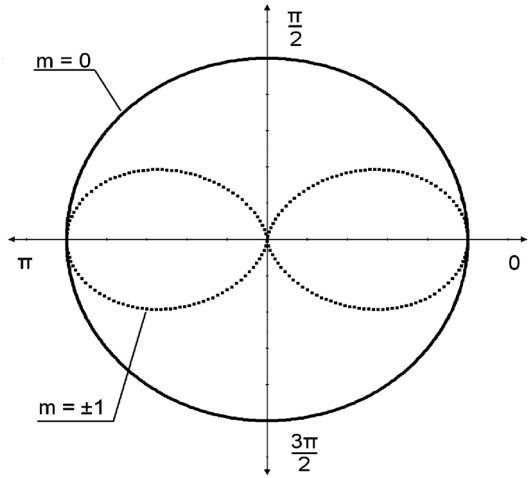

Рис. 7.1. Структурирование электронной плотности вероятности по углу φ

В традиционной модели атома водорода отсутствует пространственно структурированное распределение электронной плотности вероятности при движении по углу φ и можно думать, что приведенные выше рассуждения это математический фокус и такого быть не может. Однако за этим стоит вполне определенная физика явлений. Дело в том,

что когда квантовая частица помимо собственно квантового движения совершает ещё какое-то механическое движение, например, поступательное, то фактически частица участвует в двух движениях и в этом случае её плотность вероятности структурируется в пространстве (см. подробнее в [3]). Электрон в атоме водорода в возбужденном состоянии помимо квантового движения совершает ещё вращательное механическое движение с вполне определенным моментом количества движения и, следовательно, его электронная плотность вероятности должна быть структурирована в пространстве.

Проверка полученного результата на экспериментальном факте показывает следующее. Известно, что средний дипольный момент атома водорода равен нулю [4]. Компонента электрического момента электрона в проекции на ось z равна $D_z = ez = er\cos\theta$. Тогда

$$\bar{D}_z = e\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\psi^2_{nlm}(r,\theta)r^3 dr\cos\theta\sin\theta\cdot d\theta\int_0^{2\pi}\cos^2 m\kappa\cdot d\varphi = 0.$$

Второй интеграл по $d\theta$ – равен нулю, поскольку подынтегральное выражение является нечетной функцией $\cos\theta$ в симметричных пределах. Это и требовалось доказать.

Таким образом, в атоме водорода должно существовать структурированное распределение плотности вероятности электрона при движении по углу φ для возбужденных состояний, что возможно будет сказываться при его взаимодействии с внешними полями и другими квантовыми объектами.

Литература

1. Ghosh S.K., Deb B.M. Densities, Density-Functionals and Electron Fluids // Physics Reports (Review Section of Physics Letters). – 1982. V. 92, № 1. – P. 1-44.

2. Алексеев Б.В., Абакумов А.И. Об одном подходе к решению уравнения Шредингера // Доклады Академии наук – 1982. Т. 262. – С. 1100-1102.

3. Неволин В.К. Квантовый транспорт в устройствах электроники // М.: Техносфера. – 2012. – 87 с.

4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука 1974. С. 130.

8. КВАДРУПОЛЬНЫЕ МОМЕНТЫ АТОМА ВОДОРОДА [1]

В предыдущем разделе было показано, что плотность вероятности нахождение электрона, двигающегося вокруг ядра, в отличие от традиционных представлений структурирована в большей мере, чем это известно ранее, а это должно приводить к более детальным представлениям, в частности, уточнению значений квадрупольного момента атома. Отличие электрических квадрупольных моментов от известных ранее должно приводить к наблюдению более существенной анизотропии квадрупольного излучения или к большим флуктуациям интенсивности излучения разреженного газа возбужденных атомов водорода в заданной точке и к большей средней интенсивности излучения.

Для доказательства такого утверждения целесообразно решить задачу об атоме водорода в представлении плотности вероятности, непосредственно описывающую ее распределение во всех возможных квантовых состояниях [2–4], что и было сделано. Задачу можно решать и в представлении Шредингера [5]. 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:

$$\Psi_\varphi = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left(e^{im\varphi} + e^{-im\varphi}\right), \tag{8.1}$$

поскольку нет предпочтительного направления для вращательных состояний.

В возбужденных состояниях структурирование плотности вероятности по углу φ должно приводить к различию квадрупольных моментов, вычисленных с помощью прежних волновых функции для атома водорода и новых выражений для плотности вероятности. Квадрупольные моменты будем вычислять по формулам [6]:

$$Q_{ik}^{nlm} = e\int \rho_{nlm}(r,\theta,\varphi)\left(3x_i x_k - \delta_{ik}r^2\right) drd\theta d\varphi.$$

Конкретные вычисления показывают, что в принятой системе координат недиагональные квадрупольные элементы во всех случаях равны нулю. Диагональные элементы по оси z совпадают $Q_{zz}^{nlm} = \tilde{Q}_{zz}^{nlm}$. Здесь Q_{zz}^{nlm} вычислен с помощью волновых функций атома водорода, $\tilde{Q}_{zz}^{nlm}$ вычислен в представлении плотности вероятности, когда имеет место структурирование по углу φ. Квадрупольные моменты по осям x, y совпадают $Q_{xx}^{nlm} = \tilde{Q}_{xx}^{nlm}$ и $Q_{yy}^{nlm} = \tilde{Q}_{yy}^{nlm}$ при $m = 0$ и $m > 1$. Квадрупольные моменты при $m = 1$ различаются:

$$\tilde{Q}_{xx}^{nl1} = \frac{Q_{xx}^{nl1}}{2} - \frac{Q_r^{nl}}{8}; \quad \tilde{Q}_{yy}^{nl1} = 3Q_{yy}^{nl1} + 3Q_r^{nl}/4, \tag{8.2}$$

где $Q_r^{nl} = e\int_0^\infty R_{nl}^2(r) r^4 dr$. Интеграл имеет смысл среднего квадрата радиуса распределения электронной плотности в атоме. Различие квадрупольных моментов при $m = 1$ соответствует «двухлистному» распределению плотности вероятности (см. рис. 1, в [1]), когда имеет место ось симметрии второго порядка. В этом случае поперечные составляющие не равны между собой и $\tilde{Q}_{xx}^{nl1}$ и $\tilde{Q}_{yy}^{nl1}$ существенно отличаются от $Q_{xx}^{nl1} = Q_{yy}^{nl1}$. Различие электрических моментов должно иметь место и для мультиполей более высокого порядка.

Разница в величинах квадрупольных моментов при $m = 1$ может проявляться при исследовании квадрупольного излучения атома водорода, водородоподобных ионов и водородоподобных атомов в соответствующих квантовых состояниях. Интенсивность излучения линий равна:

$$I(A,B) = N(a) 2\pi\hbar\nu \cdot A_g; \quad A_g = \frac{16\pi^5\nu^5}{15\hbar c^5} \sum_{a,b} \left| \left\langle a \left| e(3x_i x_k - \delta_{ik} r^2) \right| b \right\rangle \right|^2,$$

где A_g – вероятность электрического квадрупольного перехода; *N(a)* – количество атомов, находящихся в данный момент в начальном состоянии *a*; *b* – конечное состояние; *A* и *B* – состояния высшего и низшего энергетических уровней, между которыми происходит переход; $\sum_{a,b}$ – обозначает, что интенсивность линии (*A*, *B*) равняется

сумме интенсивностей её компонент; ν – частота линии. Составляющую волновых функций по углу φ нужно брать в виде (8.1). Квадрупольное излучение может проявляться, например, при исследовании послесвечения метастабильных уровней [7].

Структурирование электронной плотности вероятности для возбужденных атомов водорода должно проявляться и для дипольных переходов. Правила отбора будем вычислять для оптического электрона и только для движения по углу φ, поскольку остальные составляющие матричных элементов перехода совпадают. Вычисления проводим согласно [5], имеем:

$$D^{z}_{n'l'm',nlm} = \frac{ez_{n'l'm',nlm}}{\pi}\int_0^{2\pi}\cos m\varphi\cdot\cos m'\varphi\cdot d\varphi = \tilde{D}^{z}_{n'l'm',nlm}\delta_{m,\pm m'}; \qquad (8.3)$$

$$D^{x}_{n'l'm',nlm} = \frac{ex_{n'l'm',nlm}}{\pi}\int_0^{2\pi}\sin\varphi\cdot\cos m\varphi\cdot\cos m'\varphi\cdot d\varphi = 0; \qquad (8.4)$$

$$D^{y}_{n'l'm',nlm} = \frac{ey_{n'l'm',nlm}}{\pi}\int_0^{2\pi}\cos\varphi\cdot\cos m'\varphi\cdot\cos m\varphi\cdot d\varphi = \frac{\tilde{D}^{y}_{n'l'm',nlm}}{2}\left(\delta_{m,m'\pm1}+\delta_{m,-m'\pm1}\right). \qquad (8.5)$$

В соответствии с формулой (8.3) матричный элемент $D^{z}_{n'l'm',nlm}$ отличный от нуля для переходов $m \to \pm m'$ является вырожденным по знаку магнитного числа m для угловой составляющей волновой функции (8.1). В отличие от [5], где одна из поперечных компонент, например, $D^{x}_{n'l'm',nlm}$ является мнимой величиной, в нашем случае $D^{x}_{n'l'm',nlm} = 0$. С мнимым матричным элементом связываются переходы со смещенными частотами и с круговой поляризацией. Для $D^{y}_{n'l'm',nlm}$ возможны два дипольных перехода с изменением магнитного числа на единицу, и два связанных с изменением знака магнитного числа m, которые, однако, являются вырожденными.

Применим полученные матричные элементы и правила отбора для простого эффекта Зеемана [5]. Известно, что квантовые уровни атомов расщепляются в магнитном поле. Пусть магнитное поле направлено вдоль оси z, а электрон обладает спином и соответствующим магнитным моментом. Тогда имеется выделенное направление для вращательных состояний. Для излучательных переходов

с матричными элементами $\tilde{D}^{z}_{n'l'm',nlm}$ в силу законов сохранения энергии возможны только переходы без изменения знака магнитного числа $m \to m'$. Изучение будет распространяться поперек магнитного поля, и плоскость линейной поляризации несмещенной частоты будет проходить через направление магнитного поля. Для излучательных переходов с матричными элементами $D^{y}_{n'l'm',nlm}$ возможны четыре типа переходов со смещенной частотой: два линейно поляризованных $m \to m' \pm 1$ с плоскостью поляризации перпендикулярной направлению магнитного поля и два вращательных перехода со смещенной частотой и изменением знака $m \to -m' \pm 1$ и направлением излучения вдоль оси z. Получается пять возможных пиков излучения: два пика со смещенной частотой вдоль направления магнитного поля и три пика излучения поперек магнитного поля с линейной поляризацией (зеемановский триплет).

Таким образом, в магнитном поле структурирование электронной плотности вероятности для вращательных состояний в возбужденных атомах водорода не изменяет правила отбора для дипольного излучения и уточняет величины матричных элементов.

Литература

1. Неволин В.К. Атом водорода: что нового? Наноинженерия. 2013. № 2. С. 46.

2. Ghosh S.K., Deb B.M. Densities, Density-Functionals and Electron Fluids // Physics Reports (Review Section of Physics Letters). – 1982. V. 92, № 1. – P. 1-44.

3. Алексеев Б.В., Абакумов А.И. Об одном подходе к решению уравнения Шредингера // Доклады Академии наук – 1982. – Т. 262. – С. 1100-1102.

4. Неволин В.К. Квантовый транспорт в устройствах электроники // М.: Техносфера. – 2012. – 87 с.

5. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механика // М.: Наука. 1976. – С. 384.

6. Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М. Теория поля // М.: ГизФМЛ. 1960. 400 с.

7. Дебров В.Л., Серов В.В., Тепер Н.И. Исследование излучения атома водорода под действием импульса титан-сапфирового лазера // Компьютерная оптика – 2010 – Т. 34. – № 2. – С. 156-161.

9. СПИН И ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ЛОКАЛИЗАЦИЯ СВОБОДНЫХ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ

Неотъемлемым свойством квантовых частиц, как следует из предыдущих разделов, является наличие «собственной» энергии движения квантовых частиц совершающих инфинитное движение. Интересно рассмотреть собственное движение квантовых частиц не совершающих поступательное движение и вернуться к толкованию спина частиц.

К проблеме толкования спина для квантовых частиц подходят с различных точек зрения. Так в работе [1] автор приходит к заключению, что спин не связан с внутренней структурой квантовых частиц, а связан с волновыми полями, окружающими эти частицы и, в частности, электрона. В этой работе приведен обзор предыдущих подходов к теории спина, в том числе дираковская теория. Точку зрения, развиваемую в работе [1], можно обосновать с помощью нерелятивистких квантовых уравнений движения, что представляет методический интерес и является основой для решения известных квантовых задач (см. заключение).

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 [2]:

$$E = m_0 c^2 = \hbar\omega. \tag{9.1}$$

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 (9.1) для квантовых частицы должно существовать поле стоячих волн плотности вероятности. Луи де Бройлю удалось найти волновую электромагнитную аналогию этого явления для электрона [2, с. 203]. Известно шредингеровское «дрожание»

дираковских электронов, связанное с колебаниями центра тяжести частицы и для проявления которого нужно привлечь волны с отрицательной энергией [2, с. 530].

Покажем, что решение квантовых уравнений движения в представлении плотности вероятности с энергией из формулы (9.1) позволяет, прежде всего, получить дискретный спектр значений спина у квантовых частиц с ненулевой массой покоя, а также представления о пространственном распределении плотности вероятности для свободных квантовых частиц.

Уравнения для инфинитного движения квантовой частицы массы m_0 в произвольном внешнем поле $W(\vec{r},t)$ в представлении плотности вероятности имеют вид [3–7]:

$$m_0 \frac{\partial \rho}{\partial t} + div \rho \vec{P} = 0; \tag{9.2}$$

$$\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = -\nabla \left(\frac{P^2}{2m_0} + W + \frac{\hbar^2 (\nabla \rho)^2}{8m_0 \rho^2} - \frac{\hbar^2 \Delta \rho}{4m_0 \rho} \right), \tag{9.3}$$

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

Для стационарного пространственно ограниченного свободного движения квантовой частицы система уравнений (9.2) и (9.3) запишется в виде:

$$E = \frac{\hbar^2 (\nabla \rho)^2}{8m_0 \rho^2} - \frac{\hbar^2 \Delta \rho}{4m_0 \rho} - = \text{const}, \tag{9.4}$$

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 и она проявляется, например, при рассеянии пучка фотонов на свободных электронах. Тогда из (9.4) получим:

$$\frac{8}{(r_0)^2} = \frac{(\nabla \rho)^2}{\rho^2} - \frac{2\Delta \rho}{\rho} \tag{9.5}$$

Расположим сферическую систему координат в центре вероятностного распределения частицы, получим:

$$\frac{8}{(r_0)^2}=\frac{1}{\rho^2}\left(\frac{\partial\rho}{\partial r}\right)^2+\frac{1}{\rho^2 r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial\rho}{\partial\varphi}\right)^2+\frac{1}{\rho^2 r^2}\left(\frac{\partial\rho}{\partial\theta}\right)^2-\frac{2}{r^2\rho}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\rho}{\partial r}\right)-$$
$$-\frac{2}{r^2\rho\sin^2\theta}\frac{\partial^2\rho}{\partial\varphi^2}-\frac{2}{\rho\cdot r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right). \qquad (9.6)$$

Будем решать это уравнение методом разделения переменных:

$$\rho(r,\theta,\varphi)=\rho_r(r)\rho_\theta(\theta)\rho_\varphi(\varphi).$$

Тогда

$$\frac{8r^2}{r_0^2}-\frac{r^2}{\rho_r^2}\left(\frac{d\rho_r}{dr}\right)^2+\frac{2}{\rho_r}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\rho_r}{dr}\right)=\frac{1}{\sin^2\theta}\left[\frac{1}{\rho_\varphi^2}\left(\frac{d\rho_\varphi}{d\varphi}\right)^2-\frac{2}{\rho_\varphi}\frac{d^2\rho_\varphi}{d\varphi^2}\right]+$$
$$+\left\{\frac{1}{\rho_\theta^2}\left(\frac{d\rho_\theta}{d\theta}\right)^2-\frac{2}{\rho_\theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\rho_\theta}{d\theta}\right)\right\}=\lambda^2 \qquad (9.7)$$

Из (9.7) получим систему уравнений:

$$\frac{8r^2}{r_0^2}-\frac{r^2}{\rho_r^2}\left(\frac{d\rho_r}{dr}\right)^2+\frac{2}{\rho_r}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\rho_r}{dr}\right)=\lambda^2=\text{const}. \qquad (9.8)$$

$$\frac{1}{\rho_\varphi^2}\left(\frac{d\rho_\varphi}{d\varphi}\right)^2-\frac{2}{\rho_\varphi}\frac{d^2\rho_\varphi}{d\varphi^2}=\beta^2=\text{const}. \qquad (9.9)$$

И последнее уравнение:

$$\lambda^2=\frac{\beta^2}{\sin^2\theta}+\frac{1}{\rho_\theta^2}\left(\frac{d\rho_\theta}{d\theta}\right)^2-\frac{2}{\rho_\theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\rho_\theta}{d\theta}\right). \qquad (9.10)$$

Обратимся к уравнению (9.9), которое решается подстановкой $\frac{1}{\rho_\varphi}\frac{d\rho_\varphi}{d\varphi}=u(\varphi)$. Тогда $\rho_\varphi=\cos^2\frac{\beta\varphi}{2}$ и чтобы ρ_φ была однозначной

функцией для константы β должны выполняться соотношения β = 0, ±1, ±2, ±3, ... Введем квантовое число

$$s = \left|\frac{\beta}{2}\right| = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$$

соответствующее спинам элементарных частиц, при этом $\rho_\varphi = \cos^2 s$ и $|\beta| = 2s$. Спин является степенью свободы квантовых частиц и, как будет показано ниже, определяет пространственную структуру распределения плотности вероятности. На рис. 9.1 представлены распределения плотности вероятности $\rho_\varphi(\varphi)$ при различных значения спина частиц.

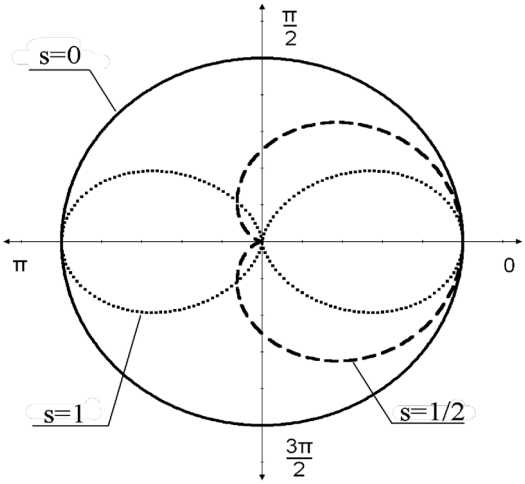

Рис. 9.1. Распределение плотности вероятности при движении по углу φ

Обратимся к решению уравнения (9.10). Будем искать решение этого уравнения в виде:

$$\rho_\theta = \sin \theta^{2s}.$$

Получим следующие соотношения для констант разделения переменных:

$$\beta^2 = 4s^2; \quad \lambda^2 = 4s + 4s^2.$$

На рис. 9.2 показаны зависимости плотности вероятности $\rho_\theta(\theta)$ при различных значениях спинового числа.

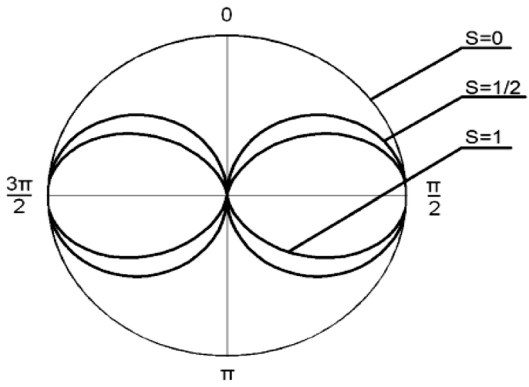

Рис. 9.2 Распределение плотности вероятности $\rho_\theta(\theta)$ при различных значениях спинового числа

Из рисунка можно видеть, что чем больше спин частицы, тем меньше область распределения плотности вероятности по углу θ.

Обратимся к решению уравнения (9.8). Сделаем замену переменных:

$$\rho_r = \frac{\alpha^2(r)}{r^2} \quad \text{и} \quad r = x \cdot r_0.$$

Получим уравнение

$$\frac{d^2\alpha}{dx^2} + \left(2 - \frac{s(s+1)}{x^2}\right) \cdot \alpha = 0. \tag{9.11}$$

Приближенное решение уравнения (9.11) для радиальной составляющей плотности вероятности запишем в виде суперпозиции асимптотик $x \to 0$ и $x \to \infty$, которые обеспечивают равенство второй производной $\frac{d^2\alpha(x_c)}{dx^2} = 0$ в точке $2 - \frac{s(s+1)}{x_c^2} = 0$.

$$\alpha \cong \sin x\sqrt{2} + \frac{x_c^s \sin x_c\sqrt{2}}{x^s}; \quad x_c = \sqrt{\frac{s(s+1)}{2}}. \tag{9.12}$$

Для частиц с нулевым спином это решение является точным и в размерных величинах записывается в виде осциллирующей и затухающей функций

$$\rho_r = \frac{r_0^2 \sin^2\left(\sqrt{2}\cdot r/r_0\right)}{r^2}. \qquad (9.13)$$

На рис. 9.3 показано распределение радиальной плотности вероятности частиц с нулевым спином. Оно напоминает известный пакет для плоских волн де Бройля, который, как известно, расплывается со временем.

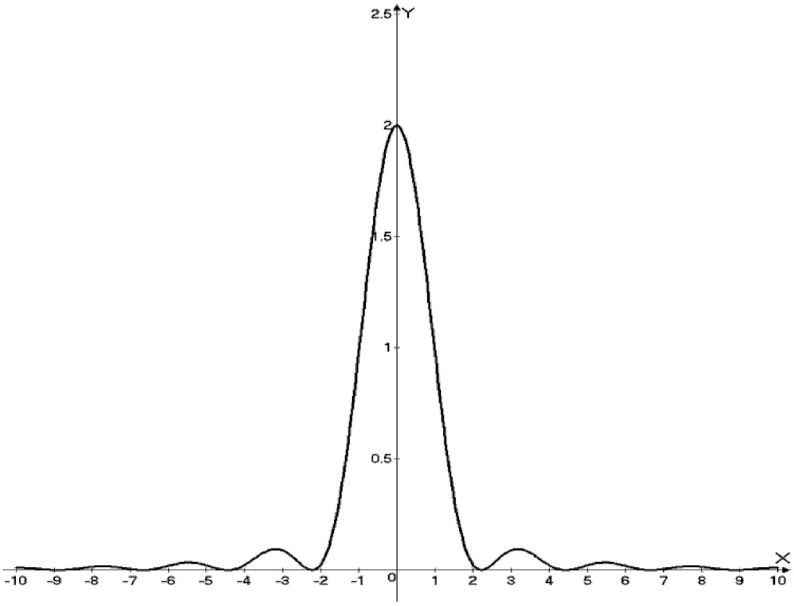

Рис. 9.3. Распределение радиальной плотности вероятности для частиц с нулевым спином.

Характерный радиус области локализации частицы равен

$$r_\rho = \frac{\pi}{\sqrt{2}} r_0 \approx 2{,}2 r_0. \qquad (9.14)$$

Для частиц с ненулевым спином решение уравнения (9.11) является расходящимся при $x \to 0$ и не интегрируем по объему частицы. Тогда следует предположить, что частицы с отличным от нуля спином имеют более сложную пространственную структуру движения, например, имеется полость с нулевой плотностью вероятности. На периферии частицы, как и прежде, имеется пространственно структурированное и осциллирующее распределение плотности вероятности в соответствии с формулой (9.13).

Характерный внешний радиус локализации частиц с отличным от нуля спином можно оценить в соответствии с (9.12) по формуле:

$$r_{sp} \cong \frac{r_0}{\sqrt{2}}\left[\pi + \left(\frac{x_c\sqrt{2}}{\pi}\right)^s \sin\left(x_c\sqrt{2}\right)\right]. \qquad (9.15)$$

Как видно из предыдущего, свободные частицы с отличным от нуля спином совершают вращательно-колебательные движения. Покажем, что в уравнении (9.11) должно выполняться соотношение:

$$2 - \frac{s(s+1)}{x^2} > 1.$$

Действительно, перейдем к физическим переменным, получим

$$E = m_0 c^2 > \frac{\hbar^2 s(s+1)}{2m_0 r^2}. \qquad (9.16)$$

Соотношение (9.16) показывает, что если квантовая частица, как «сгусток» энергии движется по законам квантовой механики, то вращательная составляющая движения не должна превышать полную энергию частицы. Поскольку спин частиц ограничен, то в соответствии с неравенством (9.16) получаем область с радиусом r, недоступную для движения частицы («темное пространство»):

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

Поскольку внутренний радиус области недоступности движении должен всегда быть меньше внешнего радиуса локализации

(формула (9.15)), то получается ограничение на все возможные значения спинов

$$\sqrt{s(s+1)} < \pi + \left(\frac{\sqrt{s(s+1)}}{\pi} \right)^{s} \sin\left(\sqrt{s(s+1)}\right). \qquad (9.18)$$

Стабильные элементарные частицы с отличной от нуля массой и известным рядом значений спина $s = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2$ удовлетворяют этому неравенству. Значение $s = 5/2$ это наибольшее значение удовлетворяющее этому неравенству. Возможно, оно несколько неточно, поскольку используется приближенное решение (9.12).

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 квантовой частицы имеется заряд, то за счет вращательных состояний возникают замкнутые токи и соответствующий магнитный момент, связанный со спином частицы. Решение квантовых уравнений движения в представлении плотности вероятности для частиц с ненулевой массой покоя дает известную последовательность их спинов. Периферийная пространственная структура плотности вероятности зависит от их спинового числа и имеет радиальную область «дрожания». Характерный радиус локализации частиц можно оценить по формуле (9.15). Например, в этой модели область локализации электрона является «пухлой» $r_{sp} = 1{,}4 \cdot 10^{-10}$ см по сравнению с областью локализации протона $r_{sp} = 7{,}4 \cdot 10^{-10}$ см.

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

$$\Delta\Psi(r,\theta,\varphi) + \frac{2m^2c^2}{\hbar^2}\Psi = 0. \qquad (9.19)$$

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:

$$\Psi_\varphi = C\left(e^{is\varphi} + e^{-is\varphi}\right), \qquad (9.20)$$

поскольку нет предпочтительного направления для вращательных состояний. Это есть «дрожание» для вращательных состояний. Использование одного слагаемого в волновой функции означает, что заведомо задано направление вращения и положение спина в пространстве. Тем не менее, возобладало описание вращательного движения с помощью одного слагаемого в этой формуле, например, для движения электрона в атоме водорода [8]. Использование формулы (9.20) для атома водорода приводит, например, к отличию значений квадрупольных моментов для возбужденных состояний от прежних вычислений [9].

Литература

1. Ohania H.C. What is spin? Am. J. Phys. – 1986. V. 54. № 6. P. 500-505.

2. Де Бройль Луи. Избранные научные труды. Т.1. Становление квантовой физики. – М., Логос. 2010. 552 с.

3. Ghosh S.K., Deb B.M. Densities, Density-Functional and Electron Fluids // Physics Reports (Review Section of Physics Letters). – 1982. V. 92, № 1. – P. 1-44.

4. Алексеев Б.В., Абакумов А.И. Об одном подходе к решению уравнения Шредингера // Доклады Академии наук – 1982. Т. 262. – С. 1100-1102.

5. Кузелев М.В.. Рухадзе А.А. О квантовом описании линейных кинетических свойств бесстолкновительной плазмы. УФН, 1999, т. 169, № 6. С. 687-689.

6. Кузелев М.В.. Рухадзе А.А. Нерелятивисткая квантовая теория вынужденных черенковского излучения и комптоновского рассеяния в плазме. ФНТ, 2011, Т.37, № 9/10 С. 1-7.

7. Неволин В.К. Квантовый транспорт в устройствах электроники. – М.: Техносфера, 2012. – 87 с.

8. Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М., ГизФМЛ. 1963. С. 227.

9. Неволин В.К. Атом водорода: что нового? Наноинженерия 2013. № 2. С. 46.

10. ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ СУБАТОМНЫХ СОСТОЯНИЙ ВОДОРОДА

Представление спина квантовых частиц как некого волнового движения с областью «темного» пространства в вероятностном центре распределения плотности вероятности позволило предложить идею субатома водорода, в котором в центре темного пространства электрона находится протон.

Предсказание субатомного состояния водорода весьма актуально для объяснения экспериментальных данных, полученных в области низкоэнергетических ядерных реакций [1–3].

Возможность существования субатомных состояний атома водорода покажем с помощью использования формулы де Бройля:

$$E = \hbar\omega = m_0 \cdot c^2. \qquad (10.1)$$

Смысл этой формулы заключается в том, что элементарная частица с массой покоя m_0 имеет собственную квантовую энергию движения, несвязанную с поступательным движением квантовой частицы.

Субатомные состояния атома водорода возможны тогда, когда расстояния между протоном и электроном настолько малы, что перекрываются области их пространственной локализации, вызванные наличием собственной квантовой энергии движения.

Уравнение для отыскания энергии связи системы, состоящей из электрона (индекс 1) и протона (индекс 2) запишется в виде:

$$\left(-\frac{\hbar^2\Delta_1}{2m_1}-\frac{\hbar^2\Delta_2}{2m_2}\right)\Psi-\frac{e^2\Psi}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}=(E_1+E_2-\varepsilon_0)\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2). \qquad (10.2)$$

Здесь $E_1 = m_1c^2$; $E_2 = m_2c^2$ – собственные энергии электрона и протона; ε_0 – энергия связи субатома. Система координат расположена в центре распределения вероятности системы из двух частиц.

В уравнении (10.2) попробуем «выключить» вклад движения протона в полную энергию системы и свести задачу к одноэлектронному виду. Учтем, что масса протона существенно превосходит

массу электрона $m_2 >> m_1$ и комптоновская длина электрона r_{10} много больше комптоновской длины протона r_{20}, $r_{10} >> r_{20}$, где $r_{10} = \hbar / m_1 c$ и $r_{20} = \hbar / m_2 c$. Это неравенство позволяет поместить начало координат в центре локализации протона, поскольку собственная пространственная область локализации протона значительно меньше области собственной локализации электрона. Тогда из (10.2) имеем:

$$-\frac{\hbar^2 \Delta_1}{2m_1}\Psi - \frac{e^2 \Psi}{r_1} = (E_1 - \varepsilon_0)\Psi(\mathbf{r}_1). \qquad (10.3)$$

Внешне уравнение (10.3) напоминает задачу о традиционном атоме водорода. Это одночастичное приближение для двухчастичной квантовой системы в нашем случае несколько ущербно и главное не учитывает наличия спина у протона и не может предсказать орто- и парасостояний субатомного водорода. В работе [4] сделана попытка решить это уравнение методом теории возмущений для случая $E_1 >> \varepsilon_0$. Такой подход вдохновлялся оценками энергии связи «нейтрония» (порядка 10^3 эВ) и экспериментальными данными, приведенными в работе [2]. При $E_1 >> \varepsilon_0$ решение уравнения (10.3) не может дать обычного квантования энергии связи ε_0. Использование в первом прядке теории возмущения является достаточно грубым приближением. Волновые функции нулевого приближения представляют собой неоднородные стоячие волны, интегралы от которых расходятся [4]. В связи с этим проводилось обрезание интегралов для получения наибольшей величины энергии связи.

Заметим, что в работе [5] автор проводит аналитический расчет системы «электрон+протон» со скачкообразным потенциалом, состоящим из кулоновской энергии и положительной модельной постоянной потенциальной энергии. Наличие постоянной составляющей энергии в принципе соответствует нашей задаче. Однако в нашем случае положительная энергия строго определена и равна собственной энергии электрона $m_1 c^2$, кроме того учитываются спиновые состояния электрона.

Для решения уравнения (10.3) используем сферическую систему координат и как обычно метод разделения переменных в задаче о падающей частице на силовой центр [6]. Представим $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\, Y(\theta)\Phi(\varphi)$, получим уравнения:

$$\frac{r^2}{R}\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2r}{R}\frac{dR}{dr} + \frac{2me^2r}{\hbar^2} + r^2(E_1 - \varepsilon_0) = \lambda^2; \tag{10.4}$$

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -\beta^2; \tag{10.5}$$

$$\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{d\theta^2} + \frac{\operatorname{ctg}\theta}{Y}\frac{dY}{d\theta} - \frac{\beta^2}{\sin^2\theta} + \lambda^2 = 0. \tag{10.6}$$

Сначала решаем уравнение (10.5). Его решение запишем в виде отличном от [6]:

$$\Phi = C\left(e^{i\beta\varphi} + e^{-i\beta\varphi}\right) = 2C\cos\beta\varphi. \tag{10.7}$$

Здесь учитывается тот факт, что оба вращательных направления равновероятны, в результате имеем колебательные состояния по углу φ, а условие однозначности будет выполняться для составляющей плотности вероятности

$$\rho_\varphi = \Phi\Phi^* = 2\left|C^2\right|\cos^2\beta\varphi \tag{10.8}$$

В результате имеем более общий ряд квантования: $\beta = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$ Далее примем $\beta = \frac{1}{2} = s$ – величина, равная спину электрона, которая не должна изменяться во внешних полях, в том числе в поле протона.

Найдем частное решение уравнения (10.6) для основного состояния в виде $Y = \sin\theta^\beta$. Для констант разделения получим выражение $\lambda^2 = \beta(\beta + 1)$.

Для решения уравнения (10.4) введем безразмерную переменную

$$r = x\frac{\hbar}{m_1 c} = x \cdot r_{10}. \tag{10.9}$$

Получим:

$$\frac{d^2R}{dx^2}+\frac{2}{x}\frac{dR}{dx}+R\left(\frac{2\gamma}{x}-\alpha^2-\frac{\lambda^2}{x^2}\right)=0, \qquad (10.10)$$

где $a=\hbar^2/m_1e^2$ – боровский радиус атом водорода; $a >> r_{10}$; $r_{10}/a=e^2/\hbar c=\gamma=1/137$ – постоянная тонкой структуры; $\varepsilon=\frac{2\varepsilon_0}{m_1c^2}$; $\lambda^2=s(s+1)=\frac{3}{4}$; $\alpha^2=\varepsilon-2$. Для свободной частицы $\varepsilon=0$ и задача сводится к отысканию собственного волнового поля электрона. Такое поле вычислено аналитически в [4] и оно представляет собой радиальную стоячую неоднородную волну. Будем решать уравнение (10.10) в случае, когда $\varepsilon > 2$, полагая, что энергия связи должна превышать собственную энергию квантового движения электрона, чтобы удержать его в кулоновском поле протона. Это модель электронного облака, обусловленного собственной энергией движения электрона, в центре которого находится протон.

Решение будем искать в виде:

$$R(x)=x^{1/2}\left(Ae^{-\alpha x}+Be^{\alpha x}\right). \qquad (10.11)$$

где $\alpha=\sqrt{\varepsilon-2}$. В скобках опустим второе слагаемое, которое возрастает с увеличением координаты, и подставим искомое решение в уравнение (10.10). Получим:

$$2\gamma = 3\alpha \quad \text{или} \quad \varepsilon=2+\gamma^2\frac{4}{9}.$$

Тогда энергия связи равна практически собственной энергии квантового движения электрона

$$\varepsilon_0=m_1c^2+\frac{2}{9}\frac{e^2}{a}, \qquad (10.12)$$

где a – боровский радиус. Среднее расстояние электрона от протона определим как:

$$r_{10}\approx\frac{e^2}{m_1c^2}=2{,}8\cdot10^{-13}\text{ см}.$$

Область локализации протона оценим из соотношения:

$$r_{20}=\frac{\hbar}{m_2c}=0{,}2\cdot10^{-13}\text{ см}.$$

Величины областей локализации электрона и протона различаются более чем на порядок. Заметим, что область локализации свободного электрона за счет собственной энергии движения составляет $r_{10} = \hbar / m_1 c = 4 \cdot 10^{-11}$ см, что много меньше области локализации электрона в традиционном атоме водорода.

Таким образом, подтверждается исходная модель субатома водорода в виде облака электрона, обусловленная его собственной энергией движения, внутри которого находится протон. Энергия связи составляет $\varepsilon_0 \approx 5 \cdot 10^5$ эВ, что на два порядка больше, предсказываемой ранее [4]. При образовании таких атомов должно наблюдаться жесткое рентгеновское излучение. При столкновении электрона с протоном, электрон нужно затормозить в области локализации протона с характерными размерами менее $2{,}8 \cdot 10^{-13}$ см. Такая ситуация возможна при столкновении двух электронов в области локализации протона. При этом энергия одного из электронов должна соответствовать энергии связи субатома. Необходимо также наличие магнитного поля для ориентации спинов заряженных частиц. Напряжение, приложенное к разрядной трубке, может составлять при этом всего лишь несколько киловольт [2]. Полезно использовать магнитное поле и для торможения электронов относительно протонов до энергий равных энергии связи субатомов водорода.

Экспериментальное доказательство существования субатомов водорода послужит подтверждением справедливости соотношения де Бройля (10.1). Наконец, заметим, что это пока не совсем совершенное изложение идей субатома водорода и восследующих разделах оно будет уточнено.

Литература

1. C. Arata, Y-C. Zhang. Proceedings of the Japan Academy. Ser. B: Physical and Biological Sciences. **78**, № 3, 57 (2002).

2. Ю.Л. Ратис. Журнал формирующихся направлений науки. 1, № 2, 27, (2013). http://www.unconv-science.org/n2.

3. C. Amsler. Particle data group. Phys. Lett. B. № 1. 667 (2008).

4. В.К. Неволин. Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. № 10 (ч.5), 789, (2015). http://search.rae.ru.

5. V. Ignatovich. https://www.academia.edu/14205552.

6. Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М.: Физматлит. 1963. С. 130.

11. АТОМЫ ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ ГИПОТЕЗЫ *ЛУИ ДЕ БРОЙЛЯ* [8]

В этом разделе изложено обобщенное представление о возможных состояниях атома водорода с учетом идеи Луи де Бройля. Рассматривается возможность экспериментального наблюдения субатомов водорода.

Выдающийся французский физик Луи де Бройль написал, по меньшей мере, две великих формулы: выражение для волновой функции свободной квантовой частицы, носящей его имя, где обобщил выражения для импульса и энергии квантовой частицы на случай когда масса покоя не равна нулю и соотношение

$$E = \hbar\omega = m_0 \cdot c^2. \tag{11.1}$$

Смысл этой формулы заключается в том, что элементарная частица с массой покоя m_0 имеет собственную квантовую энергию движения с частотой ω. Эта формула предложена де Бройлем в 1923 году в своей докторской диссертации в виде гипотезы. В последующем он показал, что эта формула является инвариантной и удовлетворяет известным релятивистским преобразованиям, поскольку частота и масса частицы преобразуются по одинаковым законам и справедлива, в том числе, и при отсутствии поступательного движения квантовых частиц [1].

Используя уравнение Шрёдингера и формулу (11.1) можно получить описание двух квантовых состояний для атома водорода. Одно традиционное описание атома водорода, излагаемое в учебниках по квантовой механике, другое – новое, субатомное состояние.

Запишем уравнение Шрёдингера для атома водорода с учетом формулы (11.1) в соответствии с рис. 11.1.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_0\Psi(\vec{r}_0,\vec{r}_1,\vec{r}_2) - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1\Psi - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_2\Psi - \frac{e^2\Psi}{\left|\vec{r}_0 + \vec{r}_1 - \vec{r}_2\right|} = (E_2 + E_1 - \varepsilon)\Psi. \tag{11.2}$$

Здесь первое слагаемое описывает движение вероятностного центра электрона относительно вероятностного центра протона, который принят за начало координат. Второе слагаемое описывает собственное движение электрона относительно своего вероятностного центра за счет энергии $E_1 = mc^2$. Третье слагаемое описывает собственное движение протона относительно собственного вероятностного центра с энергией $E_2 = Mc^2$. Последнее слагаемое в левой части уравнения описывает кулоновское взаимодействие электрона с протоном. В уравнении (11.2) приняты обозначения: ε – энергия связи атома водорода; m, M – соответственно массы покоя электрона и протона.

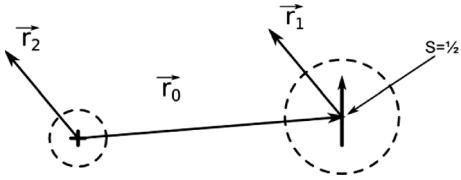

Рис. 11.1. Координаты атома водорода

Из уравнения (11.2) и рис. 11.1 можно видеть, что бы потенциальная энергия взаимодействия заряженных частиц в каждой точке была однозначна, нужно положить во всем пространстве:

$$\vec{r}_1 \equiv \vec{r}_2. \tag{11.3}$$

Тогда в уравнении (11.2) можно провести разделение переменных и записать его виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_0\Psi_0(\vec{r}_0)\cdot\Psi_1(\vec{r}_1)\cdot\Psi_2(\vec{r}_2)-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1\Psi_0\Psi_1\Psi_2-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_2\Psi_0\Psi_1\Psi_2-\frac{e^2\Psi_0\Psi_1\Psi_2}{|\vec{r}_0|}=$$
$$=(E_2+E_1-\varepsilon)\Psi_0\Psi_1\Psi_2.$$

Из этого уравнения получаем три уравнения. Первое уравнения является стандартным для описания атома водорода в нерелятивистском приближении и его решение приводится во всех учебниках по квантовой механике:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_0\Psi_0(\vec{r}_0)-\frac{e^2\Psi_0}{|\vec{r}_0|}=(-\varepsilon)\Psi_0. \tag{11.4}$$

Второе и третье уравнения описывают собственное движение электрона и протона за счет энергий $E_1 = mc^2$, $E_2 = Mc^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1\Psi_1 = E_1\Psi_1; \quad -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_2\Psi_2 = E_2\Psi_2. \tag{11.5}$$

Решением этих уравнения являются стоячие неоднородные волны, затухающие на бесконечности и описывающие пространственную локализацию с учетом спина частиц [2]. Для электрона в нашем случае принято $s = 1/2$:

$$\Psi_1(r_1,\theta_1,\varphi_1) = \frac{C_1 J_1(r_1\zeta_1)}{\sqrt{r_1}}\cos\frac{\varphi}{2}\sin^{1/2}\theta \tag{11.6}$$

Здесь J_1 – функция Бесселя первого порядка. Заметим, что согласно (11.3) и (11.5) спины заряженных частиц в атоме водорода должны быть коллинеарные и иметь одинаковое направление. Таким образом, суммарный спин атома водорода равен единице.

Рассмотрим другой частный случай, когда вероятностные центры локализации совпадают, $\vec{r}_0 = 0$. Это возможно, поскольку волновые функции собственного движения квантовых частиц в вероятностных центрах локализации равны нулю. Тогда из (11.2) получаем уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_2\Psi - \frac{e^2\Psi}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = (E_2 + E_1 - \varepsilon)\Psi \tag{11.7}$$

Уравнение (11.7) можно представить в виде двух уравнений, если сделать замену переменных

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \Psi(\vec{r},\vec{r}_2) = \Psi_1(\vec{r})\Psi_2(\vec{r}_2),$$

где $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ и провести разделение переменных, получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_2\Psi_2(\vec{r}_2) = E_2\Psi_2(\vec{r}_2); \tag{11.8}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_1(\vec{r}) - \frac{e^2\Psi_1(\vec{r})}{|\vec{r}|} = (E_1 - \varepsilon)\Psi_1(\vec{r}). \tag{11.9}$$

Уравнение (11.8) аналогично одному из уравнений (11.5) и описывает собственное движение протона за счет энергии E_2. Уравнение (11.9) описывает субатомные состояния водорода согласно [3]. Рассмотрим эти состояния более подробно и внесем некоторые изменения в отличие от результатов работы [3].

Решение уравнения (11.9) имеет вид:

$$\Psi_a(r,\theta,\varphi) = C_a r^{1/2} \exp(-r\alpha)\cos\frac{\varphi}{2}\sin^{1/2}\theta. \qquad (11.10)$$

Энергия связи равна:

$$\varepsilon_a = m_0 c^2 + \frac{2e^2}{9a} \approx 5\cdot 10^5 \text{ эВ}. \qquad (11.11)$$

Здесь боровский радиус $a = \hbar^2/m_0 e^2$. Это состояние имеет наибольшую энергию связи и устойчиво к малым взаимным смещениям вероятностных центров протона и электрона [4].

Рассмотрим конкретную систему пористый титан насыщенный водородом (это может быть и дейтерий). Будем нагревать эту систему до некоторой температуры, такой, что бы возникли возбужденные атомы водорода, а в спектре теплового излучения атомов водорода будет заметна ультрафиолетовая составляющая с длиной волны $\lambda = 1{,}215\cdot 10^{-5}$ см. Это первая линия серии Лаймана. В этом случае электроны атомов водорода будут туннелировать в зону проводимости титана (рис. 11.2). Работа выхода электрона из титана равна $e\varphi = 3{,}95$ эВ, что больше разницы между вакуумным уровнем водорода и первым возбужденным уровнем. Она равна $\varepsilon_2 = 3{,}4$ эВ. Таким образом, атомы водорода могут частично находиться в ионизованном состоянии. Со дна валентной зоны титана электроны с нулевой энергией поступательного движения могут через множество уровней переходить на субатомный уровень ионизованного водорода, при этом будет выделяться суммарная энергия равная $\sim\varepsilon_a$ в соответствии с (11.12). Многоуровневые переходы обеспечат «мягкое» излучение рентгеновских квантов. Преимущественный переход электронов на субатомный уровень связан с тем, что энергия Ферми электронов составляет $\varepsilon_f = 13{,}55$ эВ и находится ниже основного уровня атома водорода, отсчитанного от вакуумного уровня $\varepsilon_1 = 13{,}55$ эВ.

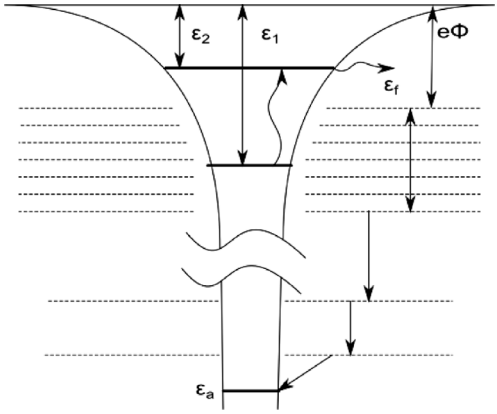

Рис. 11.2. Энергетические диаграммы атома водорода и титана.

Субатомы водорода могут приближаться к ядрам других элементов как нейтральные частицы на достаточно близкие расстояния, поскольку протон экранирован электронной оболочкой с большой собственной энергией.

Запишем уравнение движения субатома водорода в поле ядра с Z-номером в таблице Менделеева

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\,\Psi_1(\vec{r}_1,\vec{r}_0)+\frac{e^2Z\Psi_1}{r_0}-\frac{e^2Z\Psi_1}{|\vec{r}_1+\vec{r}_0|}=(E_1-\varepsilon)\Psi_1(\vec{r}_1,\vec{r}_0) \qquad (11.12)$$

Здесь r_0 – расстояние от центра ядра до вероятностного центра субатома. Будем считать $\vec{r}_0$ – параметром задачи и переформируем уравнение (11.12) в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_1(\vec{r}_1,\vec{r}_0)-\frac{e^2Z\Psi_1}{|\vec{r}_1+\vec{r}_0|}=\left(E_1-\frac{e^2Z}{r_0}-\varepsilon(r_0)\right)\Psi_1(\vec{r}_1,\vec{r}_0). \qquad (11.13)$$

Это уравнение дает решение для связанных состояний, когда сумма слагаемых в скобках в правой части отрицательна. Несвязанные состояния возникают, когда субатом в сильном электрическом поле ядра распадается на электрон и протон, при положительном значении суммы слагаемых в скобках. Энергия связи будет равна нулю при:

$$\varepsilon\left(r_0^{\min}\right)=E_1-\frac{e^2Z}{r_0^{\min}}=0;\quad r_0^{\min}=\frac{Ze^2}{m_0c^2}=Z\cdot 2{,}8\cdot 10^{-13}\text{ см}. \qquad (11.14)$$

Для ядер титана с $Z = 22$ радиус сближения равен $r_0^{\min} \approx 6{,}2 \cdot 10^{-12}$ см. Доставка протона в электронной оболочке на такие расстояния к ядрам эквивалентна энергии налетающего протона ~500 кэВ и должна заметно повысить вероятность ядерных реакций. Заметим, что для управляемого термоядерного синтеза тепловая энергия дейтонов должна составлять ~10 кэВ [7].

Таким образом, о существовании субатомов водорода в рассматриваемой системе пористый титан + водород можно судить по косвенным признакам: появлению новых элементов и рентгеновскому излучению, которые могут проявиться при нагревании и экспозиции системы во времени. Результаты подобных первых экспериментов описаны в обзоре [5]. С последними экспериментальными работами в этом направлении можно ознакомиться в обзоре [6].

Литература

1. Луи де Бройль. Избранные научные труды. Т. 1. М.; Логос, 2010. С. 61. См. также Т. 4. М.: Принт – ателье. 2014. С. 112.

2. Nevolin V.K. Spin and spatial localization of free quantum particles. International Journal of Unconventional Science. 3. № 7, (2015) (http://www.unconv-sciense.org/n7).

3. Nevolin V.K. Binding Energy of Subatomic States of Hydrogen. IJAER V.11, № 7, P. 4676-4678 (2016).

4. Неволин В.К. Устойчивость субатомных состояний водорода. Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. № 12 (ч. 4) С. 611-614. 2015, http://www.applied-research.ru.

5. Царев В.А. Низкотемпературный ядерный синтез. УФН, 1990, Т. 160, № 11, С. 1-53.

6. Пархомов А.Г. Никель-водородные реакторы, созданные после публикации отчета об эксперименте в Лугано. International Journal of Unconventional Science. 2016. № 11. С. 58-62. http://www.unconv-science.org/n11.

7. Арцимович Л.А. Управляемые термоядерные реакции. М.: ГизФМЛ 1961, 467 с.

8. Nevolin V.K. Hydrogen Atoms based on the Hypothesis of Louis de Broglie. IJAER V.11, № 12, P. 7875-7877 (2016).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С предсказанием субатомных состояний атомов водорода автор связывает почти 20-летния история понимания и устранения противоречий в традиционной нерелятивисткой квантовой механике. На мой взгляд, эти противоречия возникли из-за описания квантовых систем с помощью волновых функций и отказа от описания квантовых систем с помощью физических переменных. Идея подхода в этой брошюре состоит в том, что бы решать все квантовые задачи в двух представлениях: в представлении волновых функций и представлении плотности вероятности и сравнивать полученные результаты. Такой подход позволил получить ряд принципиальных результатов. Перечислим их ниже.

Энергия свободных квантовых частиц, совершающих инфинитное движение, должна всегда состоять из двух слагаемых: энергии поступательного движения и собственной квантовой энергии движения, которая не равна нулю даже в том случае, если поступательная энергия равна нулю, поскольку природа квантовых частиц неизменна. Этот факт подтверждает формула де Бройля, высказанная в виде гипотезы и связывающая собственную энергию квантовых частиц с постоянной Планка. В связи с этим решение ряда задач о движении квантовых частиц в потенциальных полях в представлении плотности вероятности позволил получит ряд новых результатов [1, 2]. В частности, удалось уточнить выражения для квадрупольных моментов атомов водорода.

Формула де Бройля позволила посмотреть на спин квантовых частиц несколько с другой стороны, а именно, с волновой стороны – это квантовая круговая стоячая волна плотности вероятности. В связи с эти у квантовых частиц с ненулевой массой покоя имеется «темное» пространство вокруг вероятностного центра движения частиц. Так родилась идея субатомов водорода –

вложить в «темное» пространство электрона протон, который занимает значительно меньшую пространственную область локализации. Далее подход, учитывающий собственную энергию квантовых частиц, был распространен на все возможные состояния водорода.

Автор выражает благодарность неординарному молодому человеку Владу Жигалову за вдохновляющие беседы по новым нестандартным экспериментам.

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. 87 с.

Научное издание

Неволин Владимир Кириллович

СУБАТОМНЫЕ СОСТОЯНИЯ ВОДОРОДА

Сборник статей

Компьютерный набор, корректура
и форматирование автора
Технический редактор Кулакова Г.А.
Подписано в печать 26.08.2016
Бумага офсетная.
Гарнитура PetersburgC
Формат 60×84 1/16
Печать трафаретная. Печ. л. 4,13.
Тираж 500 экз. Заказ № 039-16.

Отпечатано в типографии ИД «Академия Естествознания»,
440026, г. Пенза, ул. Лермонтова, 3