Журнал Формирующихся Направлений Науки
номер 7(3), стр. 6-9, 2015
©Авторы, 2015
статья получена: 26.05.2014
статья принята к публикации: 12.02.2015
http://www.unconv-science.org/n7/nevolin/
©Association of Unconventional Science, 2015

Спин и пространственная локализация свободных квантовых частиц

В.К. Неволин[1]

***Аннотация*—В нерелятивистской квантовой механике спин как ещё одна степень свободы квантовых частиц постулируется на основе экспериментальных данных. Покажем, воспользовавшись идеей де Бройля, что в представлении плотности вероятности спин может являться решением нерелятивистских квантовых уравнений движения.**

***Index Terms*—спин, плотность вероятности, пространственное распределение.**

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 нерелятивистских квантовых уравнений движения, что представляет как методический интерес, так и может являться 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]:

$$E = m_0 c^2 = \hbar\omega \tag{1}$$

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. Ниже показано, что использование релятивисткого выражения для полной энергии частицы в нерелятивистких квантовых уравнения движения позволяет получить спектр квантования спина для квантовых частиц. При этом в силу формулы (1) для квантовых частицы должно существовать поле стоячих волн плотности вероятности. Луи де Бройлю удалось найти волновую электромагнитную аналогию этого явления для электрона [2], стр.203. Известно шредингеровское “дрожание” дираковских электронов, связанное с колебаниями центра тяжести частицы и для проявления которого нужно привлечь волны с отрицательной энергией [2], стр.530.

Покажем, что решение квантовых уравнений движения в представлении плотности вероятности с энергией из формулы (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, своеобразное “дрожание” вероятностного центра тяжести 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], [4], [5], [6], [7]:

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

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

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

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

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

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 (4) получим:

$$\frac{8}{(r_0)^2} = \frac{(\nabla\rho)^2}{\rho^2} - \frac{2\Delta\rho}{\rho} \tag{5}$$

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

[1] Национальный исследовательский университет МИЭТ, д.ф.-м.н., *vkn@miee.ru*.

$$\frac{8}{(r_0)^2} = \frac{1}{\rho^2}(\frac{\partial\rho}{\partial r})^2 + \frac{1}{\rho^2 r^2 sin^2\theta}(\frac{\partial\rho}{\partial\varphi})^2 + \frac{1}{\rho^2 r^2}(\frac{\partial\rho}{\partial\theta})^2 -$$
$$-\frac{2}{r^2\rho}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\rho}{\partial r}) - \frac{2}{r^2\rho\sin^2\theta}\frac{\partial^2\rho}{\partial\varphi^2} - \frac{2}{\rho r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{d}{d\theta}) \quad (6)$$

Будем решать это уравнение методом разделения переменных:

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

Тогда

$$\frac{8r^2}{r_0^2} - \frac{r^2}{\rho_r^2}(\frac{d\rho_r}{dr})^2 + \frac{2}{\rho_r}\frac{d}{dr}(r^2\frac{d\rho_r}{dr}) =$$
$$= \frac{1}{\sin^2\theta}\Big[\frac{1}{\rho_\varphi^2}(\frac{d\rho_\varphi}{d\varphi})^2 - \frac{2}{\rho_\varphi}\frac{d^2\rho_\varphi}{d\varphi^2}\Big] +$$
$$+\Big\{\frac{1}{\rho_\theta^2}(\frac{d\rho_\theta}{d\theta})^2 - \frac{2}{\rho_\theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\rho_\theta}{d\theta})\Big\} = \lambda^2 \quad (7)$$

Из (7) получим систему уравнений:

$$\frac{8r^2}{r_0^2} - \frac{r^2}{\rho_r^2}(\frac{d\rho_r}{dr})^2 + \frac{2}{\rho_r}\frac{d}{dr}(r^2\frac{d\rho_r}{dr}) = \lambda^2 = const \quad (8)$$

$$\frac{1}{\rho_\varphi^2}(\frac{d\rho_\varphi}{d\varphi})^2 - \frac{2}{\rho_\varphi}\frac{d^2\rho_\varphi}{d\varphi^2} = \beta^2 = const \quad (9)$$

И последнее уравнение:

$$\lambda^2 = \frac{\beta^2}{\sin^2\theta} + \frac{1}{\rho_\theta^2}(\frac{d\rho_\theta}{d\theta})^2 - \frac{2}{\rho_\theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d\rho_\theta}{d\theta}) \quad (10)$$

Обратимся к уравнению (9), которое решается подстановкой $\frac{1}{\rho_\varphi}\frac{d\rho_\varphi}{d\varphi} = u(\varphi)$. Тогда

$$\rho_\varphi = \cos^2\frac{\beta\varphi}{2} \quad (11)$$

и, чтобы ρ_φ была однозначной функцией, для константы β должны выполняться соотношения $\beta = 0, \pm1, \pm2, \pm3, ...$ Введем квантовое число

$$s = \Big|\frac{\beta}{2}\Big| = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, ...$$

соответствующее спинам элементарных частиц, при этом $\rho_\varphi = \cos^2 s{\cdot}\varphi$ и $|\beta| = 2s$. Спин является внутренней степенью свободы квантовых частиц и, как будет показано ниже, определяет пространственную структуру распределения плотности вероятности. На рис. 1 представлены распределения плотности вероятности $\rho_\varphi(\varphi)$ при различных значениях спина частиц.

Обратимся к решению уравнения (10). Будем искать решение этого уравнения в виде:

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

Получим следующие соотношения для констант разделения переменных:

$$\beta^2 = 4s^2 \qquad \lambda^2 = 4s + 4s^2,$$

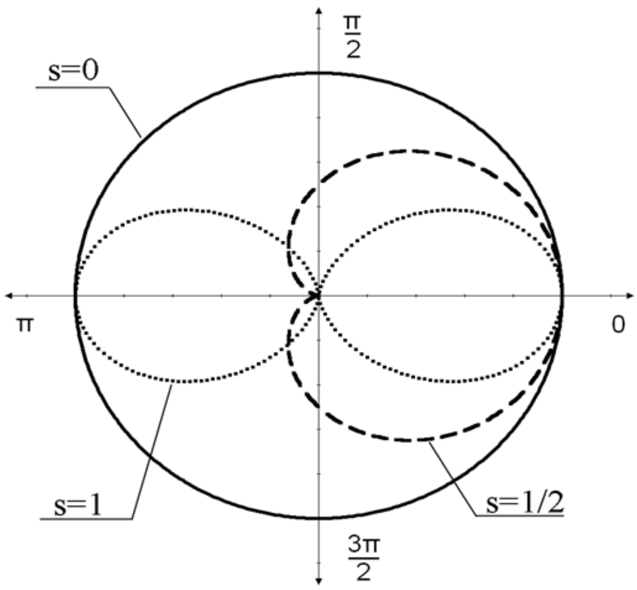

Рис. 1. Распределение плотности вероятности при движении по углу φ.

На рис. 2 показаны зависимости плотности вероятности $\rho_\theta(\theta)$ при различных значениях спинового числа.

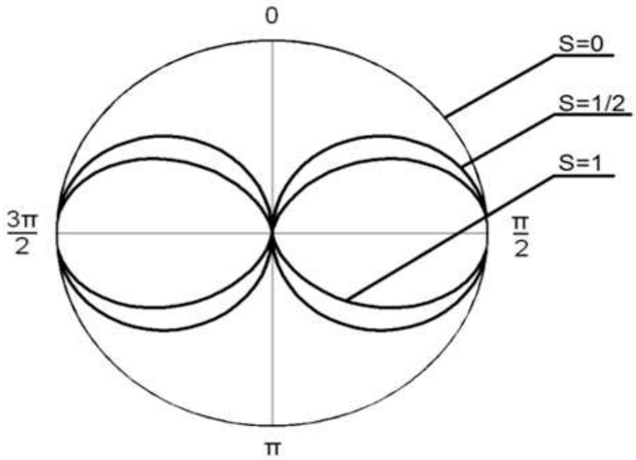

Рис. 2. Распределение плотности вероятности $\rho_\theta(\theta)$ при различных значениях спинового числа.

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

Обратимся к решению уравнения (8). Сделаем замену переменных:

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

Получим уравнение

$$\frac{d^2\alpha}{dx^2} + (2 - \frac{s(s+1)}{x^2})\alpha = 0 \quad (12)$$

Приближенное решение уравнения (12) 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 $2 - \frac{s(s+1)}{x_c^2} = 0$.

$$\alpha \cong \sin x\sqrt{2} + \frac{x_c^s \sin x_c\sqrt{2}}{x^s} \qquad x_c = \sqrt{\frac{s(s+1)}{2}} \quad (13)$$

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

$$\rho_r = \frac{r_0^2 \sin^2(\sqrt{2} \cdot r/r_0)}{r^2} \quad (14)$$

На рис. 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.

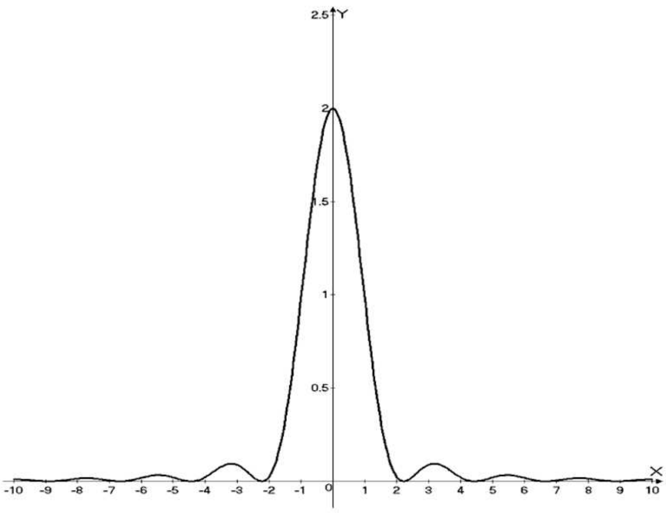

Рис. 3. Распределение радиальной плотности вероятности для частиц с нулевым спином.

Характерный радиус области локализации частицы равен

$$r_\rho = \frac{\pi}{\sqrt{2}} r_0 \approx 2,2r_0 \quad (15)$$

Для частиц с ненулевым спином решение уравнения (12) 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 (14).

Характерный внешний радиус локализации частиц с отличным от нуля спином можно оценить в соответствии с (13) по формуле:

$$r_{sp} \cong \frac{r_0}{\sqrt{2}} \Big[\pi + (\frac{x_c\sqrt{2}}{\pi})^s \sin(x_c\sqrt{2})\Big] \quad (16)$$

Как видно из предыдущего, свободные частицы с отличным от нуля спином совершают вращательно-колебательные движения. Покажем, что в уравнении (12) должно выполняться соотношение:

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

Действительно, перейдем к физическим переменным, получим

$$E = m_0c^2 > \frac{\hbar^2 s(s+1)}{2m_0r^2} \quad (17)$$

Соотношение (17) 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 (17) получаем область с радиусом r, недоступную для движения частицы.

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

В этом пространстве энергия частиц может быть только отрицательной. Заметим, что нет необходимости привлекать отрицательные значения энергии для описания спектра квантования спина частиц.

Поскольку внутренний радиус области недоступности движении должен всегда быть меньше внешнего радиуса локализации r_{sp} (формула (16)), то получается ограничение на все возможные значения спинов

$$\sqrt{s(s+1)} < \pi + \Big(\frac{\sqrt{s(s+1)}}{\pi}\Big)^s \sin(\sqrt{s(s+1)}) \quad (18)$$

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 (13).

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 (16). Например, в этой модели область локализации электрона является "пухлой" $r_{sp} = 1,4 \cdot 10^{-10}$ см по сравнению с областью локализации протона $r_{sp} = 7,4 \cdot 10^{-14}$ см.

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

$$\Delta\Psi(r,\theta,\varphi) + \frac{2m^2c^2}{\hbar^2}\Psi = 0 \quad (19)$$

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:

$$\Psi_\varphi = C(e^{is\varphi} + e^{-is\varphi}), \quad (20)$$

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 (20) для атома водорода приводит, например, к отличию значений квадрупольных моментов для возбужденных состояний от прежних вычислений [9]. По существу, решение в виде формулы (11) и его аналога в виде (20) и обеспечивает спектр квантования спина для квантовых частиц, что не было замечено ранее.

Автор выражает благодарность Л.И. Уруцкоеву за критические замечания, которые по возможности устранены.

Список литературы

[1] Ohanian H.C. What is spin? *Am. J. Phys.*, 54(6):500–505, 1986.
[2] Де Бройль Луи. *Избранные научные труды. Т.1. Становление квантовой механики.* Логос, Москва, 2010. 552 с.
[3] Deb B.M. Ghosh S.K. Densities, Density-Functional and Electron Fluids. *Physics Reports (Review Section of Physics Letters)*, 92(1):1–44, 1982.
[4] Абакумов А.И. Алексеев Б.В. Об одном подходе к решению уравнения Шредингера. *Доклады Академии наук*, 262:1100–1102, 1982.
[5] Кузелев М.В. Рухадзе А.А. О квантовом описании линейных кинетических свойств бесстолкновительной плазмы. *УФН*, 169(6):687–689, 1999.
[6] Кузелев М.В. Рухадзе А.А. Нерелятивисткая квантовая теория вынужденных черенковского излучения и комптоновского рассеяния в плазме. *ФНТ*, 37(9/10):1–7, 2011.
[7] Неволин В.К. *Квантовый транспорт в устройствах электроники.* Техносфера, М., 2012. 87 с.
[8] Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория.* ГизФМЛ, М., 1963. 227 с.
[9] Неволин В.К. Атом водорода: что нового? Часть II. *Наноинженерия*, (2):46, 2013.

***От редакции.* На данную статью поступило две рецензии, обе можно считать отрицательными. Однако, следуя принципам журнала, мы решили опубликовать данную работу, учитывая её качество и интересные полученные результаты, вместе с рецензиями и ответом автора на одну из них (см. раздел "Дискуссии").**