

Волновая функция электрона

2016г.

Дангян А.Э. araik_d@hotmail.com

Ключевые слова: электрон, волны де Бройля, волны материи, закон дисперсии, волновая функция, релятивистское уравнение, уравнение Гельмгольца.

Введение

Основным уравнением, из которого вытекала гипотеза Луи де Бройля о волновых свойствах материи, была формула, записанная им на основании гипотезы Планка о наименьшем кванте энергии и уравнения Эйнштейна, связывающего массу и энергию, $m_0c^2 = \hbar\omega_0$. Из нее следовало, что каждой порции энергии, обладающей массой m_0 , соответствует периодический процесс, частота которого равна $\frac{m_0c^2}{\hbar}$.

Применение гипотезы де Бройля к элементарным частицам, в частности к электрону, будет означать, что электрон содержит внутренний волновой процесс. Но в свое время этот волновой процесс не был обнаружен и волны де Бройля стали ассоциироваться только с механическим движением частиц.

Современная физика интерпретирует волны де Бройля как волны вероятности, не имеющие материального воплощения.

В последнее время, появились экспериментальные факты, подтверждающие первоначальную гипотезу де Бройля о существовании волн материи [3], [4].

Эти экспериментальные результаты стимулировали появление многочисленных попыток теоретического объяснения [7], [8].

В настоящей работе, путем решения релятивистского уравнения М2 [2] будет показано, что элементарные частицы, в частности электрон, вполне могут содержать волновой процесс с весьма специфическими свойствами. Волновая модель неподвижного электрона представляется в виде сферического волнового процесса.

Нестационарное уравнение М2

Преобразуем полученное в работе [2] стационарное релятивистское уравнение М2 (1.1) в нестационарную форму.

$$\Delta\Psi - \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{m^4 c^6}{(E - U(\vec{r}))^2} - m^2 c^2 \right] \Psi = 0 \quad (1.1)$$

Для этого удаляем из уравнения потенциальную энергию $U(\vec{r})$ и подставляем зависящее от времени и волновой функции значение квадрата энергии $E^2 = -\frac{\hbar^2}{\Psi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$ в уравнение.

В результате получим:

$$\frac{m^4 c^6}{\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\Psi \partial t^2}} + \frac{\hbar^2}{\Psi} \Delta \Psi + m^2 c^2 = 0 \quad (1.2)$$

Теперь необходимо найти дисперсионное соотношение для полученного уравнения (1.2).

Для этого подставим сферическую волну $\Psi = \frac{1}{r} e^{-i(\omega t - kr)}$ (1.3) в уравнение.

Определим второе производное по времени: $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -\frac{\omega^2 e^{-i(\omega t - kr)}}{r}$ (1.4)

Оператор Лапласа в сферической системе координат имеет следующий вид:

$$\Delta_{r,\theta,\varphi} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\Delta_{\theta,\varphi}}{r^2} \quad (1.5)$$

Определим результат действия оператора Лапласа на сферическую волну:

$\Delta \Psi = -\frac{k^2 e^{-i(\omega t - kr)}}{r}$ (1.6) Подставим сферическую волну (1.3) и полученные значения (1.4) и (1.6) в исходное нестационарное уравнение (1.2).

В результате получим дисперсионное соотношение в виде: $-\frac{m^4 c^6}{\hbar^2 \omega^2} - \hbar^2 k^2 + m^2 c^2 = 0$ (1.7)

Волна без дисперсии и волновой пакет без расплывания

Для полученного дисперсионного соотношения, определим фазовую и групповую скорости распространения волн.

Как известно фазовая скорость определяется через круговую частоту ω и волновое число k по формуле: $V_f = \frac{\omega}{k}$ (2.1)

Из уравнения (1.7) определим круговую частоту ω . $\omega = \sqrt{\frac{m^4 c^6}{\hbar^2 (c^2 m^2 - \hbar^2 k^2)}}$ (2.2)

Подставим полученное значение (2.2) в формулу (2.1) $V_f = \sqrt{\frac{m^4 c^6}{\hbar^2 (k^2 c^2 m^2 - \hbar^2 k^4)}}$ (2.3)

Групповая скорость определяется по формуле: $V_{gr} = \frac{d\omega}{dk}$ (2.4). Определим производную

пользуясь формулой (2.2).
$$V_{gr} = \frac{\hbar^2 k \sqrt{\frac{m^4 c^6}{\hbar^2 (c^2 m^2 - \hbar^2 k^2)}}}{c^2 m^2 - \hbar^2 k^2} \quad (2.5).$$

Построим графики зависимости фазовой и групповой скоростей от волнового числа k . Далее будем пользоваться атомной системой единиц Хартри.

$$a_0 = 1, m = 1, e = 1, \hbar = 1, c = 137.0359971, 4\pi\epsilon_0 = 1$$

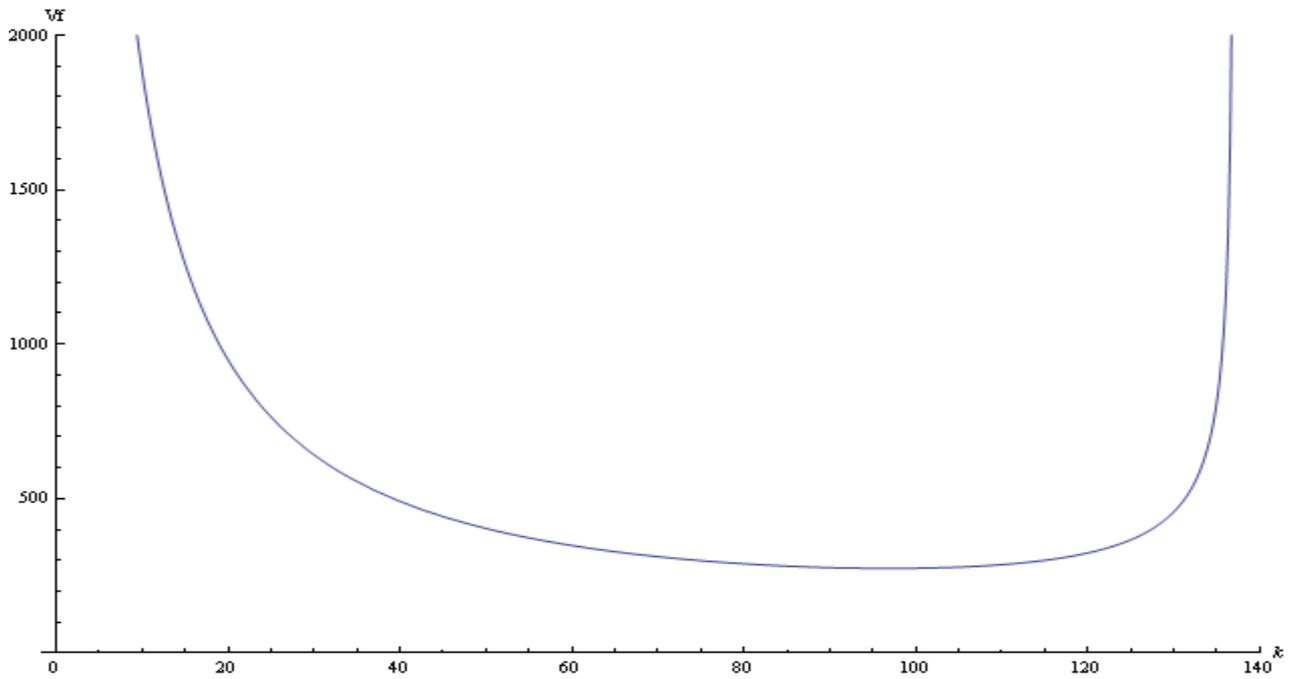


Рис.1 График зависимости фазовой скорости V_f от волнового числа k .

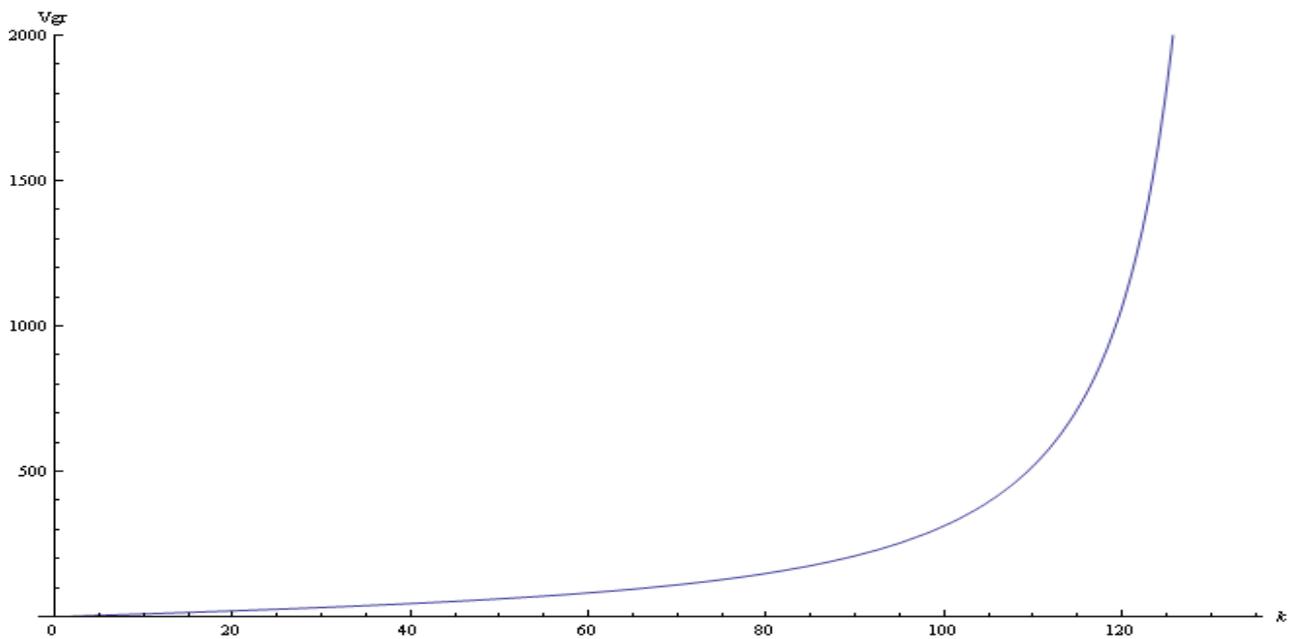


Рис.2 График зависимости групповой скорости V_{gr} от волнового числа k .

Теперь совместим оба графика на одном рисунке.

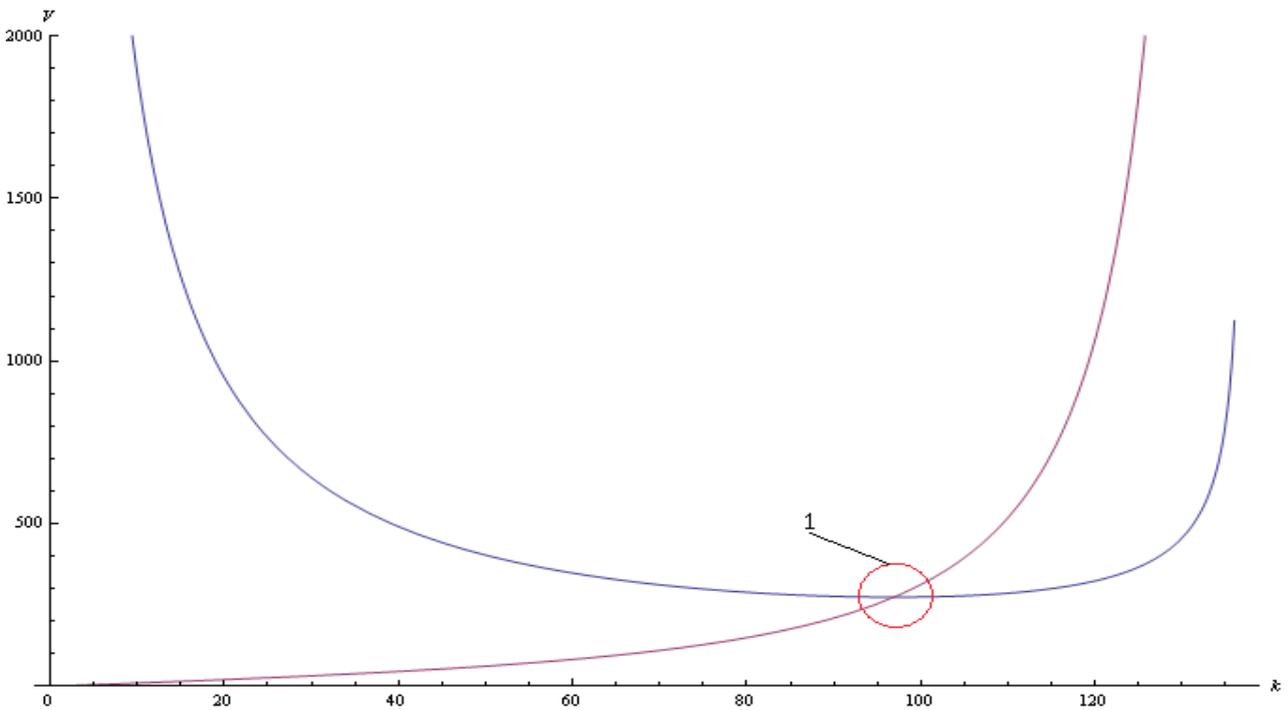


Рис.3 Совместный график фазовой и групповой скоростей.

Как можно заметить, при определенном значении волнового числа, фазовая скорость равняется групповой скорости.

Приравнявая соответствующие формулы $V_f = V_{gr}$ и решая полученное уравнение,

определяем значение волнового числа устойчивого состояния: $k_0 = \frac{cm}{\sqrt{2}\hbar}$ (2.6). При этом

значение скорости будет $V_f = V_{gr} = 2c$. И соответствующее значение круговой частоты

получим: $\omega_0 = \frac{2mc^2}{\sqrt{2}\hbar}$ (2.7). Таким образом, мы получили сферическую волну без дисперсии.

Так как, при условии равенства фазовой и групповой скоростей, дисперсия исчезает.

Полученное значение скорости в два раза выше скорости света. Но это не скорость движения электрона. Так как мы рассматриваем электрон в неподвижном состоянии. Это скорость распространения в пространстве сферической волны де Бройля (для первоначальной версии гипотезы), то есть волны материи. И поскольку полученная волна материи пока что имеет неизвестную природу, то пока не будем ограничивать ее характеристики и в частности скорость распространения.

Прежде чем продолжить, обратим внимание на следующее обстоятельство. Определим энергию покоя электрона в соответствии с формулой $E = \hbar\omega_0$. Тогда получим $E = \sqrt{2}mc^2$.

Как можно заметить, полученное значение энергии, в $\sqrt{2}$ раза больше ожидаемого значения, энергии покоя электрона $E = mc^2$.

Для устранения полученного несоответствия, введем понятие затравочной массы электрона. Которая вступая во внутренние волновые процессы, образует энергию покоя $E = mc^2$. Из

этих соображений получим значение затравочной массы $m_0 = \frac{m}{\sqrt{2}}$. И в дальнейших расчетах вместо массы электрона будем применять затравочную массу.

Тогда окончательно получим для устойчивого состояния значение волнового числа $k_0 = \frac{cm}{2\hbar}$ (2.8) и значение круговой частоты $\omega_0 = \frac{mc^2}{\hbar}$ (2.9).

Интегрируя сферические волны в небольшой окрестности $\pm\alpha$ устойчивого состояния (область 1 Рис.3.). Можно получить сферический волновой пакет без расплывания (2.10).

$$\Psi = \int_{k_0-\alpha}^{k_0+\alpha} A(k) \frac{e^{-i(\omega_0 t - kr)}}{r} dk \quad (2.10)$$

Теперь, после получения параметров устойчивого состояния электрона, имеет смысл перейти к стационарному уравнению и окончательно получить волновую функцию голого неподвижного электрона.

Для этого, подставим полученное значение затравочной массы $m_0 = \frac{m}{\sqrt{2}}$ и значение энергии покоя $E = mc^2$ в исходное стационарное уравнение (1.1) без потенциальной энергии. Тогда получим:

$$\Delta\Psi + \frac{1}{\hbar^2} \frac{m^2 c^2}{4} \Psi = 0 \quad (2.11)$$

Полученное уравнение, в теории дифференциальных уравнений, известно как уравнение Гельмгольца.

Решение уравнения Гельмгольца

Для решения уравнения (2.11) применим стандартную методику разделения переменных в сферической системе координат.

Представим волновую функцию в виде произведения радиальной и угловой частей $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$ (3.1)

Оператор Лапласа в сферических координатах выглядит следующим образом:

$$\Delta_{r,\theta,\varphi} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\Delta_{\theta,\varphi}}{r^2} \quad (3.2) \text{ Подставим произведение (3.1) в исходное уравнение (2.11).}$$

$$Y \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + Y \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + R \frac{\Delta_{\theta,\varphi} Y}{r^2} + \frac{1}{\hbar^2} \frac{m^2 c^2}{4} RY = 0 \text{ Умножим полученное уравнение на дробь } \frac{r^2}{RY} .$$

$\frac{r^2}{R} \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{r^2}{R} \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{1}{\hbar^2} \frac{m^2 c^2}{4} r^2 = -\frac{\Delta_{\theta,\varphi} Y}{Y}$ (3.3) Как можно заметить левая часть уравнения (3.3) зависит только от переменной r , а правая от переменных θ и φ . Следовательно, обе части равны некоторому постоянному числу λ . Что позволяет отделить радиальную часть уравнения от угловой части.

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{1}{\hbar^2} \frac{m^2 c^2}{4} R - \frac{\lambda}{r^2} R = 0 \quad (3.4)$$

$$\Delta_{\theta,\varphi} Y = -\lambda Y \quad (3.5)$$

Далее представим функцию $Y(\theta, \varphi)$ в виде произведения $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ (3.6). Угловая часть оператора Лапласа

$$\text{имеет следующий вид: } \Delta_{\theta,\varphi} = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \text{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (3.7).$$

$$\text{Подставим произведение (3.6) в угловое уравнение (3.5) получим: } \Phi \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \theta^2} + \Phi \text{ctg}\theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} + \Theta \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = -\lambda \Theta \Phi \quad (3.8).$$

Умножив уравнение (3.8) на дробь $\frac{\sin^2 \theta}{\Theta \Phi}$ получим:

$$\frac{\sin^2 \theta}{\Theta} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \theta^2} + \frac{\sin^2 \theta}{\Theta} \text{ctg}\theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} + \lambda \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} \quad (3.9)$$

Левая часть уравнения (3.9) зависит только от переменной θ а правая часть только от переменной φ . Следовательно, обе части равны некоторому постоянному числу, которую обозначим m^2 . В итоге получим два

$$\text{уравнения: } \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \theta^2} + \text{ctg}\theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} + \lambda \Theta - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta = 0 \quad (3.10) \quad \text{и} \quad \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + m^2 = 0 \quad (3.11)$$

Решение Φ уравнения (3.11) хорошо известно $\Phi(\varphi) = A \exp(\pm im\varphi)$ (3.12). Так как при тождественных значениях угла φ (0 и 2π) функция должна иметь одно и то же значение, то $A \exp(\pm im0) = A \exp(\pm im2\pi) = A$ и $\exp(\pm im2\pi) = 1$. Используя формулу Эйлера для комплексных чисел: $\cos(2\pi m) \pm i \sin(2\pi m) = 1$, получим $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Таким образом, m может принимать только целочисленные значения. Константа A находится из условия нормировки функции Φ . Но поскольку стандартная нормировка и вероятностная интерпретация волновой функции теперь уже не действуют, то пока этот вопрос обсуждать не будем.

Для решения Θ уравнения (3.10), воспользуемся математическим интернет ресурсом **WolframAlpha** <http://www.wolframalpha.com/>

$$\text{Решение дает: } \Theta(\theta) = c_1 P_{\frac{1}{2}(\sqrt{4\lambda+1}-1)}^m \cos(\theta) + c_2 Q_{\frac{1}{2}(\sqrt{4\lambda+1}-1)}^m \cos(\theta) \quad (3.13)$$

То есть, решением является, сумма присоединенных функций Лежандра первого и второго рода.

Сделаем обозначение $s = \frac{1}{2}(\sqrt{4\lambda+1}-1)$ (3.14). Переменная s у нас будет ассоциироваться

с квантовым числом спина. Определим область возможных значений квантового числа s . Из формулы (3.14) следует, что $4\lambda+1 \geq 0$ следовательно $s \geq -\frac{1}{2}$ (3.15). Переписав зависимость

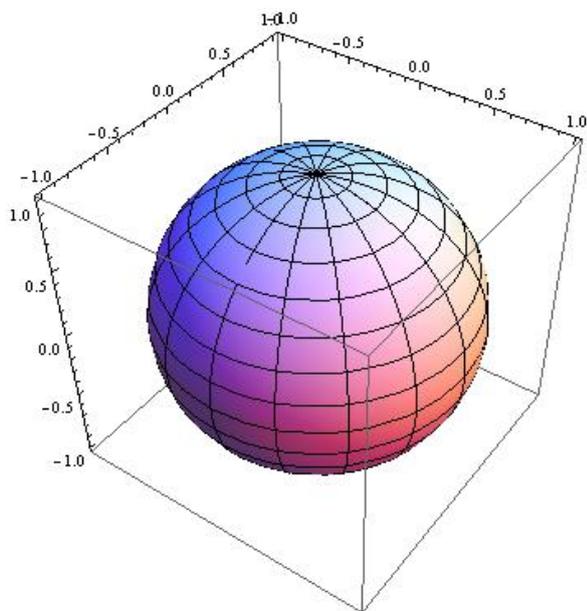
(3.14) относительно s получим $\lambda = s(s+1)$ (3.16) как и следовало ожидать. Таким образом угловая часть волновой функции будет иметь вид:

$$Y(\theta, \varphi) = [c_1 P_s^m \cos(\theta) + c_2 Q_s^m \cos(\theta)] \exp(\pm im\varphi) \quad (3.17)$$

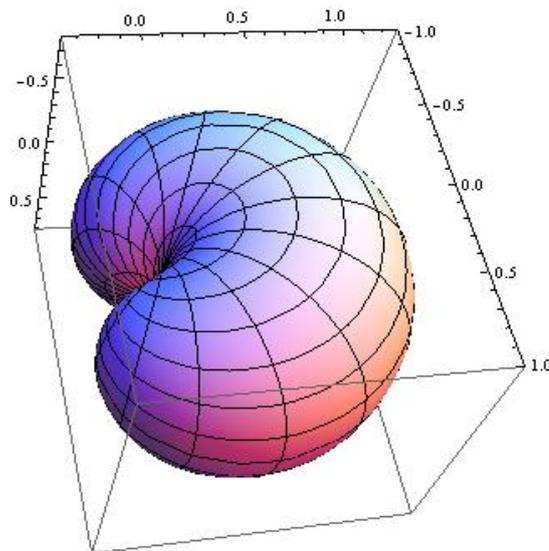
Поскольку у нас электрон находится в неподвижном состоянии, то обычные условия квантования орбитального момента не имеют места. Поэтому пока не можем говорить, что

квантовое число s может принимать только целые или полуцелые значения. Область возможных значений s будет ограничиваться только соотношением (3.15) и условием неразрывности угловой части волновой функции (3.17). Конкретные значения квантовых чисел m и s и констант интегрирования c_1 и c_2 будут зависеть от внешних факторов. То есть от граничных условий конкретной задачи. В работах автора [5] приведен подход, согласно которому квантовые числа m и s могут принимать как целые так и полуцелые значения. Мы считаем этот подход разумным.

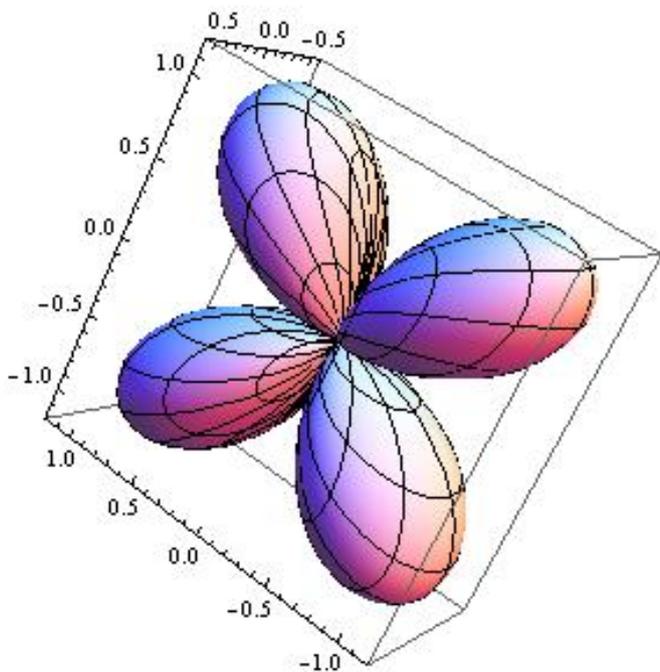
Приведем для наглядности несколько графических примеров угловой части волновой функции при различных значениях квантовых чисел m и s .



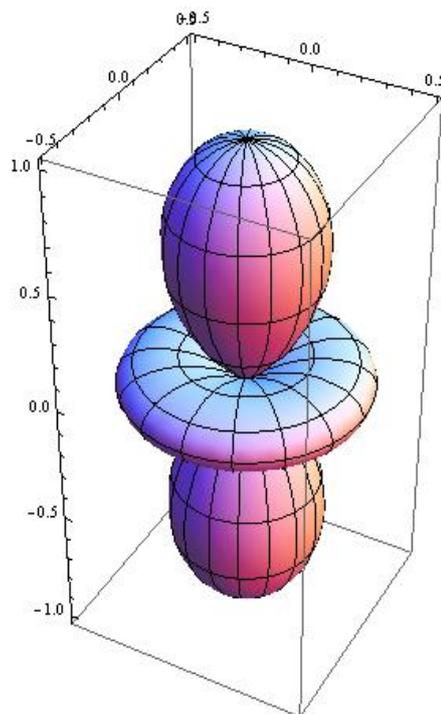
$m = 0 \quad s = 0$



$m = \frac{1}{2} \quad s = \frac{1}{2}$



$m = 1 \quad s = 2$



$m = 0 \quad s = 2$

Перейдем к решению радиального уравнения (3.4). Для этого воспользуемся математическим интернет ресурсом **WolframAlpha** <http://www.wolframalpha.com/>

Перепишем уравнение (3.4) с учетом обозначения (3.16).

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{1}{\hbar^2} \frac{m^2 c^2}{4} R - \frac{s(s+1)}{r^2} R = 0 \quad (3.18)$$

Решение имеет вид: $R(r) = k_1 \text{SphericalBesselJ}[s, \frac{cmr}{2\hbar}] + k_2 \text{SphericalBesselY}[s, \frac{cmr}{2\hbar}]$ (3.19)

То есть является комбинацией сферических функций Бесселя первого и второго рода. Как известно, сферическая функция Бесселя второго рода неограничена при $r \rightarrow 0$. Поэтому принимаем $k_2 = 0$. И окончательно радиальная часть волновой функции будет иметь вид:

$$R(r) = k_1 \text{SphericalBesselJ}[s, \frac{cmr}{2\hbar}] \quad (3.20)$$

Приведем график радиальной волновой функции в атомных единицах Хартри, для первых нескольких значений квантового числа $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$. Поскольку вопрос нормировки пока не обсуждаем, по приведенным причинам, то примем $k_1 = 1$. В единицах Хартри масса электрона $m = 1$, постоянная Планка $\hbar = 1$ и скорость света $c = 137.03599971$.

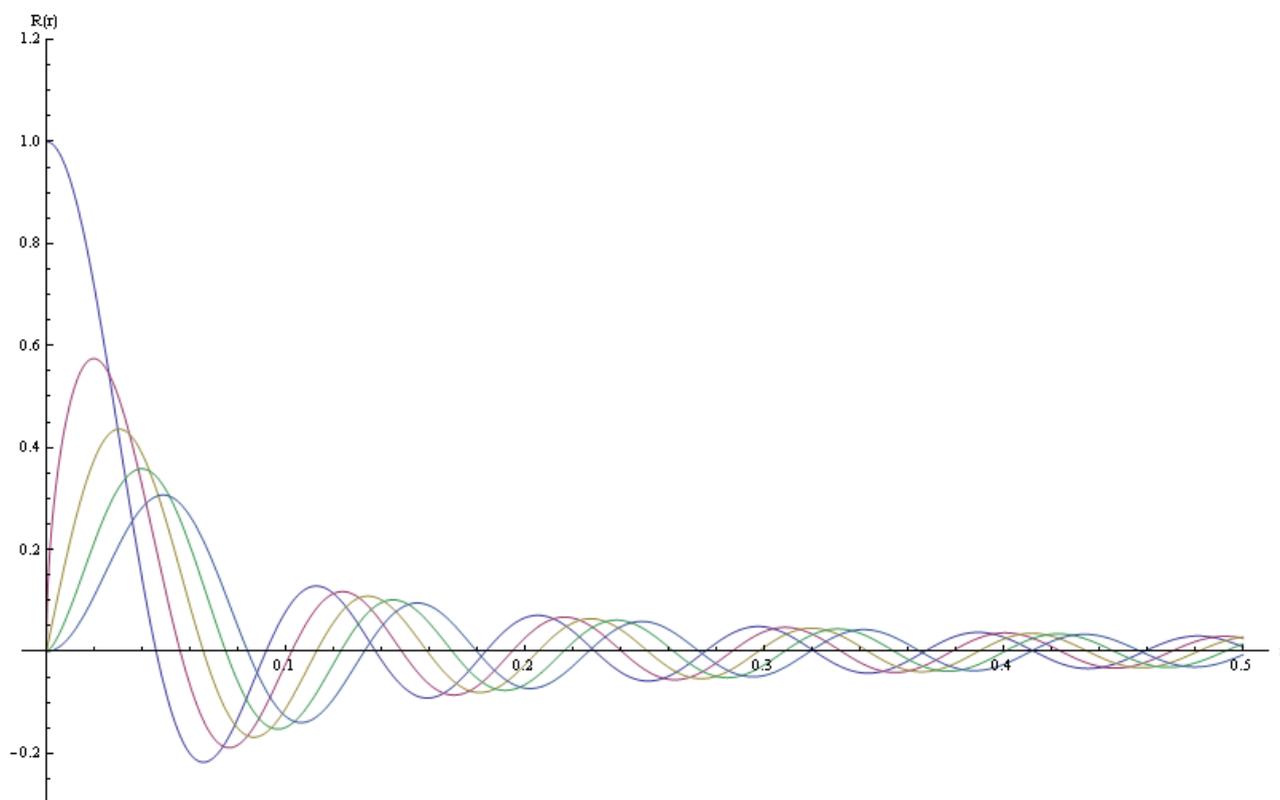


Рис. 4. График радиальной части волновой функции при значениях $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$

Таким образом, полная волновая функция электрона будет представлять, произведение радиальной, угловой и зависящей от времени частей.

$$\Psi(r, \theta, \varphi, t) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)\Psi(t)$$

$$\Psi(r, \theta, \varphi, t) = \text{SphericalBessel}J[s, \frac{cmr}{2\hbar}] * [c_1 P_s^m \cos(\theta) + c_2 Q_s^m \cos(\theta)] \exp(\pm im\varphi) \exp(-i \frac{mc^2}{\hbar} t) \quad (3.21)$$

Результаты и обсуждения

Как было показано, электрон имеет внутренний волновой процесс с частотой $\omega_0 = \frac{mc^2}{\hbar}$.

Волновой процесс выходит в наружу и образует волны материи. При этом волновое число равно $k_0 = \frac{cm}{2\hbar}$, следовательно длина волны равна $\lambda = \frac{2\pi}{k_0} = \frac{4\pi\hbar}{cm}$, а скорость распространения в пространстве двукратно превышает скорость света. Следовательно, волны материи имеют не электромагнитную природу.

Как известно, электрон характеризуется экспериментально обнаруженным значением: длиной волны Комптона $\lambda_{Comp} = \frac{2\pi\hbar}{cm}$. Следовательно, полученная длина волны составляет двукратную величину Комптоновской длины волны $\lambda = 2\lambda_{Comp}$. Отсюда можно сделать предположение, что Комптоновская длина волны связана с волновыми свойствами электрона.

В свое время Э. Шредингер не был согласен с чисто корпускулярным объяснением эффекта Комптона. И опубликовал свое волновое описание [9].

“Шредингер утверждал, что рентгеновское излучение может дифрагировать на стоячей "волне плотности заряда", созданной падающим и отраженным электроном, так же как свет дифрагирует на стоячей волне ультразвука (Born and Wolf 1959).”

Далее обнаружено, что в колебательном процессе участвует не вся масса электрона. В результате, вводится понятие затравочной массы $m_0 = \frac{m}{\sqrt{2}}$. То есть, масса электрона формируется, в результате вступления затравочной массы во внутренний волновой процесс. По аналогии можно предположить, что и затравочная масса тоже образуется в результате волнового процесса второй ступени. И следовательно, материя имеет многоступенчатую, вложенную друг в друга волновую структуру, как матрешка.

Установлено, что спин электрона не обязательно должен иметь значение $\frac{1}{2}$. Область возможных значений квантовых чисел электрона еще предстоит изучать.

Полученные результаты открывают новые горизонты для теоретических и экспериментальных исследований. Позволяют по новому взглянуть на многие экспериментальные результаты, в которых фигурируют волновые свойства электрона.

Литература

1. Луи де Бройль. Избранные научные труды. Т. 1. Становление квантовой физики: работы 1921 – 1934 годов. – М.: Логос, 2010. – 556 с.
2. [Дангян А.Э. “Новое уравнение релятивистской квантовой механики”](#)
3. Gouan`ere, M. et al., Experimental observation compatible with the particle internal clock, *Annales de la Fondation Louis de Broglie* 30, 109-114 (2005)
4. A search for the de Broglie particle internal clock by means of electron channeling
P.Catillon, N.Cue, M.J.Gaillard, R.Genre, M.Gouan`ere, R.G.Kirsch, J-C.Poizat,
J.Remillieux, L.Roussel and M.Spighel
5. Квантовая теория полей движения Д.В.Гламазда Уральский федеральный университет, Екатеринбург 18 октября 2011 г. <http://quantt.ru/>
6. Холодова С.Е., Перегудин С.И. Специальные функции в задачах математической физики. – СПб: НИУ ИТМО, 2012. – 72 с.
7. On electron channeling and the de Broglie internal clock M. Bauer
Instituto de F´isica, niversidad Nacional Aut´onoma de M´exico
and A.P. 20-364, 01000 M´exico, D.F., MEXICO
8. Hunting for Snarks in Quantum Mechanics David Hestenesa
Physics Department, Arizona State University, Tempe, Arizona 85287.
9. Srhrodinger E. The Compton effect. *Annalen der Physik*. 1927. V. 28. P. 257 – 264.