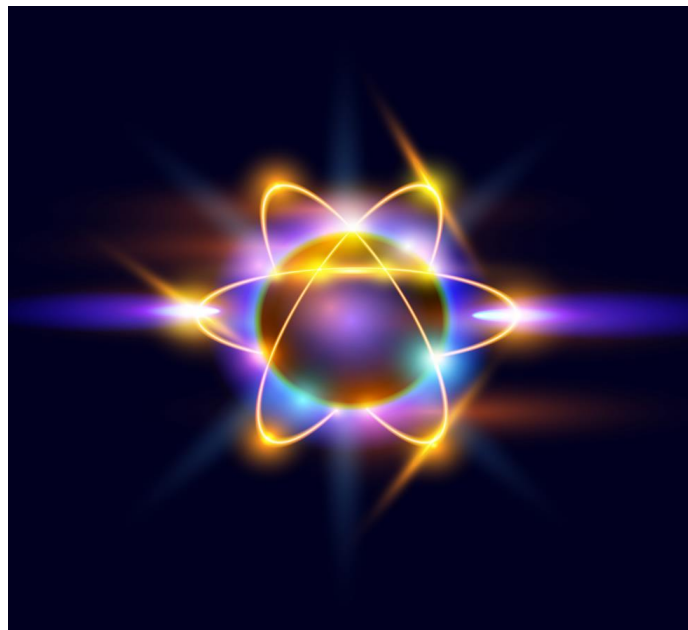


ЛЕКЦИИ СВИРСКИХ

Л.М. Свирская

Квантовая механика

Курс лекций



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Южно-Уральский государственный гуманитарно-педагогический университет»

Л.М. Свирская

Квантовая механика

Курс лекций

В двух частях

Часть I

Челябинск

2018

ББК 530.145(021)

УДК 22.314я73

С 24

Свирская, Л.М. Квантовая механика [Текст]: курс лекций: в 2 ч. Ч. I / Л.М. Свирская. – Челябинск: Изд-во Южно-Урал. гос. гуман.-пед. ун-та, 2018. – 270 с.

ISBN 978–5–91155–062–2

ISBN 978–5–91155–063–9

Пособие включает в себя курс лекций профессора М.С. Свирского и доцента Л.М. Свирской и посвящено 90-летию создания нерелятивистской квантовой механики. В нём изложены основы нерелятивистской квантовой механики, являющейся частью курса «Основы теоретической физики».

Предназначается для студентов физических специальностей педвузов.

Рецензенты: В.П. Бескачко, д-р физ.-мат. наук, профессор

Л.А. Песин, д-р физ.-мат. наук, профессор

ISBN 978–5–91155–062–2

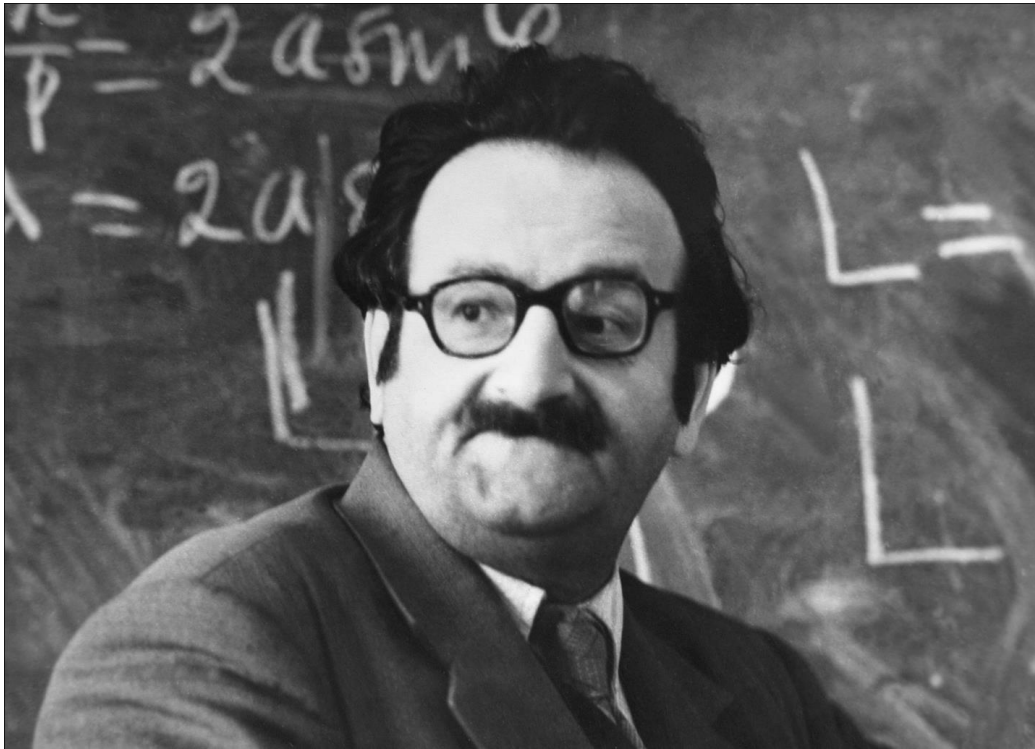
ISBN 978–5–91155–063–9

© Л.М. Свирская, 2018

© Издательство Южно-Уральского государственного гуманитарно-педагогического университета, 2018

© Издательско-полигр. ассоциация высших учебных заведений, 2018

*Посвящается моему отцу и Учителю
Моисею Соломоновичу Свирскому*



На лекции по квантовой механике на физическом факультете ЧГПИ, 1975 г.

Фото С.Г. Новикова

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие	7
Введение	13
Тема 1. Экспериментальные основы квантовой механики	18
Лекция 1. Истоки квантовой теории. Формула Планка	18
1. Проблема распределения энергии в спектре равновесного излучения	18
2. Классическая теория излучения абсолютно чёрного тела. Формулы Рэлея–Джинса и Михельсона–Вина	20
3. Гипотеза о квантовании энергии микроскопических систем. Формула Планка	25
Лекция 2. Квантовые свойства электромагнитного излучения	33
1. Гипотеза Эйнштейна о корпускулярно-волновом дуализме электромагнитного излучения. Теория фотонов	33
2. Эффект Комптона	39
Лекция 3. Дискретность атомных состояний	45
1. Модель упруго связанного электрона	45
2. Планетарная модель атома. Постулаты Бора	47
3. Теория водородоподобного атома по Бору	53
4. Квантование атома по Бору–Зоммерфельду	57
5. Затруднения теории Бора. Принцип соответствия	60
Лекция 4. Волновые свойства частиц	64
1. Волны де Бройля	64
2. Экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля	66
3. Волновая функция свободно движущейся частицы	70
4. Статистическая интерпретация волн де Бройля	72
Тема 2. Математический аппарат квантовой механики	83
Лекция 5. Уравнение Шрёдингера	83

1. Оптико-механическая аналогия Гамильтона и её роль в возникновении квантовой механики	83
2. Стационарные состояния	89
3. Плотность тока вероятности. Уравнение непрерывности	90
Лекция 6. Сопоставление операторов физическим величинам в квантовой механике	95
1. Собственные функции и собственные значения операторов	95
2. Операторы координаты, импульса, момента импульса, энергии	99
3. Принцип суперпозиции состояний и линейность операторов в квантовой механике	102
4. Суперпозиция состояний и парадокс кота Шрёдингера	113
Лекция 7. Теоремы о собственных функциях и собственных значениях линейных самосопряжённых (эрмитовых) операторов	117
1. Эрмитовы операторы и вещественность их собственных значений	117
2. Ортогональность и нормировка собственных функций	122
3. Средние значения физических величин	126
4. Условие совместной определенности физических величин. Коммутация операторов	127
5. Неравенство Гейзенберга. Принцип дополнительности	131
6. Квантовые флуктуации физических величин в стационарном состоянии. Измерения в квантовой механике	136
Лекция 8. Изменение во времени механических величин	141
1. Дифференцирование операторов по времени. Квантовые скобки Пуассона	141
2. Законы сохранения в квантовой механике и их связь со свойствами симметрии пространства и времени	144
3. Закон сохранения четности в квантовой механике	149
Лекция 9. Связь квантовой механики с классической механикой	152
1. Обобщение уравнения Гамильтона–Якоби в квантовой механике	152
2. Предельный переход к классической механике	155
3. Теоремы Эренфеста. Принцип причинности в квантовой механике	158

Основные выводы по теме № 2	163
Тема 3. Одномерные квантово-механические задачи	169
Лекция 10. Частица в потенциальном ящике	169
1. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме	169
2. Одномерная яма конечной глубины	176
Лекция 11. Линейный гармонический осциллятор (ЛГО)	180
1. Квантовое обобщение уравнения Гамильтона–Якоби для линейного гармонического осциллятора. Энергия и волновая функция основного состояния ЛГО	181
2. Энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний ЛГО. Распределение вероятностей местонахождения осциллятора	187
3. Нормировка волновых функций осциллятора	194
4. Правила отбора для ЛГО	195
Лекция 12. Прохождение микрочастицы через потенциальный барьер	199
1. Движение частицы в поле «потенциальной ступеньки»	199
2. Прохождение микрочастицы через потенциальный барьер. Туннельный эффект	205
3. Некоторые приложения теории туннельного эффекта	214
Заключение	221
Приложения	225
I. Волновой пакет	225
II. Эффект Джозефсона	230
III. Запутанные квантовые состояния	236
IV. Система двух связанных осцилляторов. Силы Ван-дер-Ваальса	249
V. Из истории создания волновой механики Шрёдингера	251
VI. «Карта» нерелятивистской квантовой механики	262
Библиографический список	267

ПРЕДИСЛОВИЕ

Данная книга включает в себя курс лекций профессора М.С. Свирского и доцента Л.М. Свирской. Её можно было бы назвать «Курс лекций Свирских по теоретической физике» (раздел «Квантовая механика»).

Крупный учёный, доктор физико-математических наук, академик Российской Академии Естествознания Моисей Соломонович Свирский (1923–2010) внёс существенный вклад в развитие преподавания теоретической физики в педагогическом вузе. Десятилетиями он создавал стройное здание курса теоретической физики в Челябинском педагогическом институте (впоследствии университете), постепенно передавая своим ученикам «ключи» от него.

Нам (его ученикам) очень повезло, поскольку самый главный раздел теоретической физики – квантовую механику – мы прослушали в изложении Моисея Соломоновича. Он был блестящим лектором этого сложного курса, читал его с большим педагогическим мастерством.

В весеннем семестре 1975 г. он читал лекции в объёме 60 часов для большого потока из четырёх групп. В аудитории 337 (ныне это аудитория № 346, носящая имя академика М.С. Свирского), с трудом вмещавшей почти 100 слушателей, собирались студенты трёх групп третьего курса специальности «физика» и спецгрупп 4 курса – «физика на английском языке» и «физика на французском языке». Лекции проходили, как правило, первыми парами, занятия начинались ровно в 8 часов утра. Многие стремились прибежать пораньше, к 7 ч 45 мин, чтобы занять место в аудитории поближе к доске.

Со звонком профессор не спеша поднимался на кафедру, ставил свою палочку возле трубы, проходящей рядом с доской, и аудитория мгновенно затихала, внимая каждому слову, которое негромким, спокойным голосом произносил этот удивительно мудрый человек. По мере продвижения вглубь квантового лабиринта речь становилась более взволнованной, подчиняясь крещендо открывающихся закономерностей (в музыке: *crescendo* – постепенное усиление звука), а доска очень скоро становилась «одетой» в узоры великих уравнений. Сам лектор, будучи студентом МГУ, слушал лекции в аудитории с ленточной доской: при нажатии кнопки уравнения просто «переезжали» повыше, их не приходилось стирать, а затем восстанавливать по мере необходимости на освободившемся кусочке доски, покрытом меловыми разводами. А здесь:

Узоры уравнений – как Врубеля мазки,
Чтоб их писать, – не хватит ни мела, ни доски.
Там много дивных формул и уравнений лес,
В котором обитают сто квантовых чудес...

Однако этот «лес» формул и уравнений совсем не вызывал какого-либо отторжения или страха. Это была физика «с человеческим лицом». Мы понимали, что перед нами – настоящий Учёный, который служил Науке. Он не подавлял нас своим интеллектом, а наоборот – очень располагал к себе, излучая какую-то теплоту и глубокое понимание того, о чём рассказывал. Моисей Соломонович считал, что студент должен уйти с лекции с пониманием того, что он там услышал.

Мало кто из присутствующих догадывался о том, что лектор стоял у доски на протезе почти метровой высоты – таковы были последствия тяжёлого фронтального ранения, пережитого им в двадцатилетнем возрасте. Бывший защитник Отечества, химразведчик, прошагавший 2,5 тысячи километров фронтовых дорог во время Великой Отечественной войны, сменивший солдатскую шинель и вещмешок на мир большой Науки в стенах главного вуза страны – Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, он постигал теоретическую физику под руководством выдающихся советских учёных. В частности, квантовую механику он прослушал в изложении самого Дмитрия Ивановича Блохинцева –

автора известного учебника «Основы квантовой механики», а деканом физического факультета МГУ в то время являлся Арсений Александрович Соколов, автор фундаментального учебника «Квантовая механика». И это влияние научной школы МГУ, безусловно, сказывалось на всей учебной деятельности кафедры теоретической физики ЧГПИ, которую тогда возглавлял Моисей Соломонович.

Весной 1975 г. лекции профессора Свирского от начала до конца прослушал вместе с нами ректор ЧГПИ, крупный учёный в области физики углеродистых материалов, доктор физико-математических наук, профессор Сергей Васильевич Шулепов, который чрезвычайно высоко ценил фундаментальность коллеги-теоретика.словно дисциплинированный студент, в 8:00 он занимал место за первой партой, не пропустив ни одной лекции!

Наконец, на третьем курсе, благодаря квантовой механике, нам открылась во всей красоте и гармонии теоретическая физика, воспринимаемая до этого просто как необходимая ступенька учебного плана, которую следовало освоить. Ведь так важно, чтобы лекции по теоретической физике читались не только математически безупречно, но и оставляли место для восхищения выдающимися достижениями этой науки.

Выпускница физмата 1954 г. Н.М. Соколова вспоминает о лекциях Моисея Соломоновича: «Он обладал умением владеть вниманием слушателей, говоря тихим, спокойным голосом о трудно понимаемых, абстрактных вещах. Представляется, что он видел эти спины, которые переворачиваются и переходят на другие уровни под действием того или другого фактора, жил среди событий, которые описываются теми или иными уравнениями. Ему там было интересно, радостно. И слушатели невольно попадали в этот же мир... студенты затихали, ловили каждое его слово».

Квантовая механика показала, что законы и понятия макроскопической физики неприменимы (или имеют ограниченную область применимости) к явлениям микромира. Мир микрообъектов противоречит «здравому смыслу», который основывается на повседневном опыте, имеющем дело с макроскопическими телами. Существенной особенностью микромира является тесная

взаимосвязь изучаемого объекта с макроскопическим прибором (наблюдателем). Специфика микромира, связанная с невозможностью отделить квантовое явление от процесса наблюдения, привела к появлению отдельного научного направления – квантовые измерения.

Новые физические понятия, введенные квантовой механикой, потребовали использования математического аппарата, освоение которого представляет большую трудность для студентов, начинающих изучать этот курс. Но квантовую механику можно понять только на её языке. Её нельзя излагать без формул, так же, как нельзя пересказывать словами музыку. В этом состоит специфика теоретической физики. Как заметил немецкий физик-теоретик Арнольд Зоммерфельд, «природу не заботит наша математическая беспомощность. Природа является значительно лучшим математиком, чем мы. Она формирует свои законы с помощью не простейших, а наиболее высоких и эффективных математических методов».

Однако барьером для изучения квантовой механики является не только её математический аппарат. Основные понятия квантовой механики не обладают наглядностью. В обычном понимании наглядностью обладает то, что можно проиллюстрировать с помощью привычных образов, без глубоких размышлений. «Ясно, что в соответствии с этим атомная физика является ненаглядной, – пишет Зоммерфельд, – разобраться в ней может помочь только математический формализм. Кто его не понимает, тот должен оставить физику в покое».

Отсутствие наглядности нельзя рассматривать как недостаток квантовой механики. Л.И. Мандельштам подчеркивал: «Не недостатком, а достоинством квантовой механики следует считать то, что она порвала с предрассудком о тождественности закономерностей в микромире и закономерностей в макромире и тем самым – предрассудком о желательности «наглядности» в описании явлений в микромире» [21].

Традиции школы преподавания теоретической физики (и квантовой механики, в частности), созданной в ЧГПУ профессором М.С. Свирским, предусматривают строгое получение и обоснование всех основных теоретических результатов.

При этом, однако, используется такая методика изложения квантовой механики, которая позволяет избежать громоздких математических вычислений и выдвинуть на первый план обсуждение физического смысла получаемых результатов. При таком способе изучения теоретической физики студенты, прослушав лекции, могут осознанно воспринимать содержание достаточно сложных учебных пособий, в которых вычислительные подробности, как правило, не приводятся. В условиях ограниченного количества часов оказывается эффективной, в частности, методика изучения квантовой механики на основе понижения порядка уравнения, являющегося квантовым обобщением классического уравнения Гамильтона–Якоби. Вместо решения дифференциального уравнения второго порядка, каким является уравнение Шрёдингера, решается дифференциальное уравнение первого порядка. Таким способом можно избежать крайностей: как догматического изложения квантовой механики (без выполнения необходимых вычислений, ссылаясь на математические дополнения в учебниках), так и длинных нерациональных вычислений, затрудняющих понимание физической сути обсуждаемой задачи.

В книге используется гауссова система единиц, которая широко применяется в теоретической физике. Для квантовой механики система СИ является крайне неудобной. В гауссовой системе:

постоянная Планка $h = 6,62 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}$;

приведённая постоянная Планка $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}$;

заряд электрона $e = 4,8 \cdot 10^{-10} \text{ единиц заряда СГСЭ}$;

масса электрона $m_e = 9,1 \cdot 10^{-28} \text{ г}$;

скорость света в вакууме $c = 3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}$;

магнетон Бора (магнитный момент электрона) $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 9,27 \cdot 10^{-21} \frac{\text{эрг}}{\text{Гс}}$;

постоянная тонкой структуры $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$.

При изложении материала учтено, что студенты уже изучили раздел «Квантовая физика» в рамках курса общей и экспериментальной физики. Поэтому вопросы, касающиеся экспериментального базиса квантовой механики, затрагиваются

лишь в той степени, которая необходима для понимания содержания курса. Предполагается также, что студенты прослушали курс «Математическая физика», знакомы с основными методами решения дифференциальных уравнений и со специальными функциями.

Материал 22 лекций (44 час.), предусмотренных действующим учебным планом, затрагивает основы нерелятивистской квантовой механики. Первая часть учебного пособия (12 лекций) имеет следующую структуру. Вначале рассматриваются экспериментальные основы квантовой механики (лекции 1–4). Затем излагается «математический минимум», представляющий собой «рабочий язык» нерелятивистской квантовой механики (лекции 5–9). В лекциях 10–12 обсуждаются точно решаемые квантово-механические задачи для одномерного движения. В Приложения вынесены вопросы, которые из-за недостатка времени не могут быть изложены на лекциях, но могут использоваться для обсуждения на семинарских занятиях и в процессе самостоятельной работы студентов над курсом квантовой механики. Материал для Приложения V подготовлен студенткой физико-математического факультета М.В. Горюновой.

ВВЕДЕНИЕ

Квантовая механика является одним из главных достижений научной мысли XX века. Наряду с теорией относительности она составляет фундамент современной физики.

До начала XX столетия для описания вещества и электромагнитного поля использовались различные законы. Движение макроскопических тел описывалось в рамках механики Галилея–Ньютона, а поле излучения – на основе теории электромагнетизма Максвелла, которая позволила понять большую совокупность явлений, рассматриваемых до этого независимо друг от друга: электричество, магнетизм, оптика. Процессы взаимодействия излучения с веществом объяснялись на основе электронной теории Лоренца. Все эти теоретические достижения, имеющие хорошее экспериментальное подтверждение, позволяли считать состояние физики вполне удовлетворительным. Ньютоновская механика, электромагнитная теория Максвелла и термодинамика представляли собой, образно говоря, «три кита», на которых покоилось здание физики конца XIX столетия.

Ситуацию, сложившуюся к началу XX века, хорошо охарактеризовал Уильям Томсон (лорд Кельвин). В своей речи 27 апреля 1900 г. на заседании Лондонского королевского общества он отметил, что физика практически решила все стоящие перед ней задачи, построила красивую и ясную теорию теплоты и света, и только два облачка омрачают ясный научный небосклон. Первое облачко – это ультрафиолетовая катастрофа в проблеме излучения абсолютно чёрного тела (АЧТ), а второе облачко – это результаты опыта Майкельсона. Причём второе облачко напоминает большую тучу. Из первого «облака» выросла квантовая теория Макса Планка в 1900 г., а из второго «облака» родилась релятивистская механика, т.е. специальная теория относительности (СТО), построенная Альбертом Эйнштейном в 1905 г.

Глубокие потрясения, которые испытала физика в начале XX века, могут быть охарактеризованы как две «революции»: релятивистская и квантовая. Возникнув практически одновременно, они поставили под сомнение справедливость классической физики с двух сторон: было установлено, что классические законы «не работают» при движении материальных частиц со скоростями, близкими к скорости света (т.е. в релятивистской области), а также в процессах атомного масштаба (т.е. в квантовой области). Это означало, что классическая механика и классическая электродинамика дошли до границ своей применимости: попытки применить классические представления к объяснению атомных явлений приводили к результатам, противоречащим опыту.

Глубокое противоречие теории с экспериментом потребовало построения новой теории, применимой к атомным масштабам. Такой теорией явилась квантовая механика – фундаментальная физическая теория, описывающая явления микромира. Место, занимаемое квантовой механикой на карте физической науки, можно наглядно проиллюстрировать с помощью «квадрата физики частиц» со стороны, равной единице (рис. 1):



Рис. 1. Место нерелятивистской квантовой механики среди других «механик»

Здесь v – характерные скорости частиц, c – скорость света, S – классическая функция действия. По осям отложены безразмерные величины, не превышающие 1. Это обусловлено тем, что согласно СТО $\frac{v}{c} \leq 1$, а максимальное значение по оси абсцисс вытекает из неравенства Гейзенберга для координаты и импульса $\Delta q \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$, левая часть которого имеет размерность действия (энергия \times время, или координата \times импульс). Таким образом, $S \geq \frac{\hbar}{2}$, откуда следует, что $\frac{\hbar}{2S} \leq 1$.

Для явлений микромира характерная величина действия $S_{хар}$ сравнима с квантом действия \hbar ($S_{хар} \sim \hbar$). Процессы, для которых $S_{хар} \gg \hbar$, называются квазиклассическими. Если величиной \hbar можно пренебречь ($\hbar \rightarrow 0$), тогда справедлива классическая механика.

Квант действия, введенный в 1900 г. Максом Планком, положил начало новому, неклассическому, способу описания явлений природы. В развитии квантовой теории в первой трети XX столетия можно выделить следующие основные этапы. Первый этап: от работ М. Планка 1900 г. до работ Н. Бора 1913 г. Второй этап – «старая квантовая теория», или квантовая теория, основанная на принципе соответствия: с 1913 г. по 1922 г.

Затем наступил период, называемый «кризисом старой квантовой теории». Последовавшая за этим эпоха получила название «золотой век теоретической физики» (1924–1927 гг.), завершившийся окончательной формулировкой нерелятивистской квантовой механики.

В 1925 г. появилась матричная квантовая механика В. Гейзенберга–М. Борна–П. Йордана. Несколько позже, в 1926 г., была создана волновая механика Э. Шрёдингера, в которой используется гамильтонов формализм. Волновая механика и матричная механика – это разные формулировки одной и той же квантовой теории. В 1926–27 гг. П. Дирак разработал векторную формулировку квантовой механики.

Формулировка квантовой теории, предложенная в 1942 г. американским физиком-теоретиком Ричардом Фейнманом [31], опирается на представление о бесконечномерном интегрировании по траекториям. В математической литературе такие интегралы называют «континуальными интегралами». Физики же,

в основном, используют термин «интегралы по траекториям». Вместо гамильтонова формализма Фейнман использует метод Лагранжа.

Нерелятивистское волновое уравнение Шрёдингера применимо для описания движения частиц, скорость которых значительно меньше скорости света. Оно не инвариантно относительно преобразований специальной теории относительности – преобразований Лоренца, поскольку координаты и время входят в это уравнение неравноправно: уравнение содержит первую производную по времени и вторые производные по координатам, в то время как согласно требованиям СТО пространственные и временные координаты должны входить в уравнения на одинаковых основаниях.

Релятивистски-инвариантное обобщение уравнения Шрёдингера было установлено в 1926 г. О. Клейном, В.А. Фоком и В. Гордоном. Соответствующее волновое уравнение для частиц с нулевым спином носит название уравнения Клейна–Гордона–Фока.

В 1928 г. П. Дирак сформулировал релятивистское волновое уравнение для частиц со спином $\frac{1}{2}$, послужившее основой для создания релятивистской квантовой механики. После уравнений классической электродинамики Максвелла–Лоренца следующий важнейший этап развития учения об электроны был связан именно с уравнением Дирака. Полуклассическая теория Бора и нерелятивистская квантовая механика явились промежуточными теориями. Изложение основ релятивистской квантовой механики выходит за рамки этой книги.

Фундаментальное описание природы является квантово-механическим. Изучение квантовой механики необходимо для понимания свойств микромира, химических, биологических, астрофизических и других явлений, от объектов неживой природы до самого феномена жизни.

К особенностям поведения микрообъектов, установленных квантовой механикой, относятся:

- 1) дискретность атомных состояний,
- 2) корпускулярно-волновой дуализм,
- 3) вероятностный характер законов микромира.

Квантовая механика оказалась пригодной для описания систем с неизменным числом частиц, в ней не рассматриваются процессы рождения,

уничтожения и взаимопревращаемости частиц. Дальнейшее обобщение квантовой механики привело к созданию квантовой теории поля (КТП), в которой взаимная превращаемость рассматривается как фундаментальное свойство элементарных частиц, являющихся квантами соответствующих полей. Основным методом, используемым в КТП – метод вторичного квантования, в котором роль независимых переменных играют числа частиц в данном квантовом состоянии, а переходы между различными состояниями описываются с помощью операторов рождения и уничтожения частиц. Изложение основ этого метода содержится, например, в [1; 7; 11; 17].

Наглядное представление о генезисе квантовой механики, её формах и перспективных направлениях использования квантовых ресурсов дает Приложение VI.

Макромир мне непонятен,
Стыну у его дверей, —
Он почти невероятен
В необъятности своей.
В микромир бы мне пробраться,
В мир незримых величин,
В край, где корни коренятся
Всех последствий и причин;
В царство малых измерений
Вникнуть, где на миллион
Действенных микромгновений
Миг обычный расщеплен;
В государство дробных чисел
И неведомых чудес.
От которых мы зависим
Более, чем от небес...

В.С. Шефнер

*«Самая большая и самая глубокая революция,
которую натуральная философия претерпела
со времён Ньютона».*
А. Пуанкаре

ТЕМА 1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Лекция 1. Истоки квантовой теории. Формула Планка

1. Проблема распределения энергии в спектре равновесного излучения

Квантовая теория возникла в результате исследований теплового излучения (излучения нагретых тел). Начало этим исследованиям положил Густав Кирхгоф, который в 1859 г. установил закон, согласно которому отношение излучательной способности тела к его поглотительной способности не зависит от природы тела и является универсальной функцией температуры и частоты:

$$\frac{E(\nu, T)}{A(\nu, T)} = \varphi(\nu, T). \quad (1.1)$$

Тело, у которого поглотительная способность равна единице, называется абсолютно чёрным телом (АЧТ), оно поглощает всю падающую на него энергию. Моделью АЧТ может служить достаточно большая полость с небольшим отверстием. Излучение, попавшее в полость через отверстие, многократно отражаясь от стенок, практически полностью поглотится. Т.е. малое отверстие будет вести себя как АЧТ, выходящее из него излучение будет равновесным тепловым излучением (сколько энергии электромагнитного поля поглощается стенками, столько же возвращается обратно в полость в единицу времени).

Из соотношения (1.1) при $A(\nu, T) = 1$ следует, что излучательная способность АЧТ

$$E(\nu, T)|_{\text{АЧТ}} = \varepsilon(\nu, T) = \varphi(\nu, T). \quad (1.2)$$

Поэтому отношение излучательной способности любого тела к его поглощательной способности равно излучательной способности $\varepsilon(\nu, T)$ абсолютно чёрного тела

$$\frac{E(\nu, T)}{A(\nu, T)} = \varepsilon(\nu, T), \quad (1.3)$$

которая связана со спектральной плотностью ρ_ν электромагнитного излучения соотношением

$$\varepsilon(\nu, T) = \frac{c}{4} \rho_\nu. \quad (1.4)$$

Из (1.3) и (1.4) следует, что если известна теоретическая формула для спектральной плотности $\rho(\nu, T)$, и если экспериментальная проверка в случае абсолютно чёрного тела подтверждает эту формулу, то можно вычислить распределение энергии в спектре для любого тела, зная его поглощательную способность. Поэтому теоретическое определение функции $\rho(\nu, T)$ представляло собой важнейшую задачу.

К концу XIX века экспериментально была установлена кривая распределения энергии в спектре АЧТ, имеющая максимум (пик с округлой вершиной, рис. 2). Она показывает, какая энергия приходится на данную частоту ν в единице объёма.



Рис. 2. Распределение энергии в спектре абсолютно чёрного тела

Однако теоретического обоснования этой кривой не было. Были получены формулы, которые удовлетворительно описывали спектр либо в области малых частот, либо для достаточно больших частот, а единой формулы не существовало.

2. Классическая теория излучения абсолютно чёрного тела. Формулы Рэлей–Джинса и Михельсона–Вина

Дж. Рэлей (1900 г.) и Дж. Джинс (1905 г.) установили формулу, которая хорошо описывала область малых частот

$$\rho_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT, \quad (1.5)$$

где c – скорость света, k – постоянная Больцмана.

Формула Рэлей–Джинса была получена в рамках классических представлений. Стенки полости, нагретые до определённой температуры T , можно рассматривать как совокупность линейных гармонических осцилляторов, играющих роль элементарных излучающих центров. В частности, каждый электрон, совершающий колебания под действием квазиупругой силы, подобен линейному гармоническому осциллятору, который согласно теории Максвелла излучает электромагнитные волны. Через некоторое время в замкнутой полости устанавливается статистическое равновесие, при котором стенки полости будут излучать и поглощать в единицу времени одну и ту же электромагнитную энергию. В полости будет существовать неизменная во времени система стоячих электромагнитных волн (рис. 3).

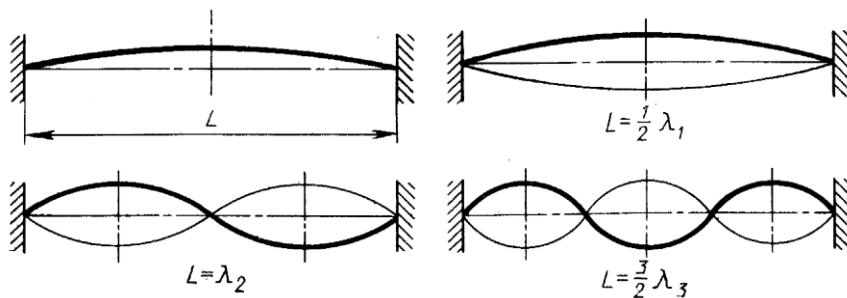


Рис. 3. Картина стоячих волн для одномерной модели

В одномерном случае для возникновения стоячей волны необходимо, чтобы на длине отрезка L укладывалось целое число полуволн: $L = n \cdot \lambda_n/2$, т.е

$$\lambda_n = \frac{2L}{n}. \quad (1.6)$$

Перейдём к частотам колебаний:

$$\nu_n = \frac{c}{\lambda_n} = \frac{cn}{2L}; \quad \nu_{n+1} = \frac{c}{2L}(n+1). \quad (1.7)$$

Из (1.7) следует, что разность соседних частот

$$\nu_{n+1} - \nu_n = \frac{c}{2L}. \quad (1.8)$$

Поэтому в кубической полости с ребром L на одно колебание приходится в пространстве частот объём

$$V_1 = \left(\frac{c}{2L}\right)^3. \quad (1.9)$$

Подсчитаем число колебаний N_ν с данной частотой ν . Построим сферу радиусом ν , дадим небольшое приращение радиусу на величину $\Delta\nu$, получим новую сферу радиусом $\nu + \Delta\nu$, и определим число колебаний, заключённых между двумя этими сферами. Для этого нужно объём заштрихованного сферического слоя разделить на объём одного колебания:

$$N_\nu \Delta\nu = \frac{4\pi\nu^2 \Delta\nu}{V_1} \cdot 2 \cdot \frac{1}{8} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot L^3 \cdot \Delta\nu. \quad (1.10)$$

Множитель 2 в этой формуле учитывает две поляризации электромагнитной волны. Далее мы должны взять только 1/8 сферы (один октант, рис. 4), чтобы учесть только положительные значения частот.

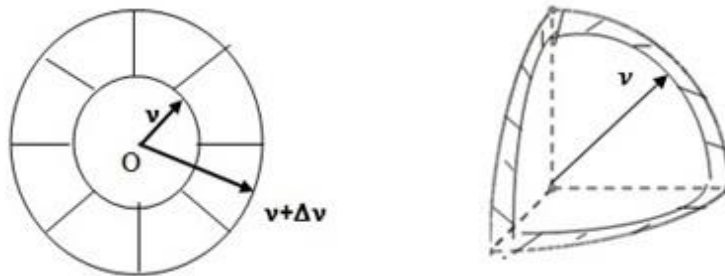


Рис. 4. К расчёту числа колебаний

Из (1.10) следует, что число колебаний с данной частотой ν в единице объёма ($L^3 = 1$) замкнутой полости определяется выражением

$$N_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}. \quad (1.11)$$

Таким образом, первый множитель в формуле Рэля–Джинса (1.5) представляет собой чисто геометрический фактор.

Покажем, что второй множитель в формуле (1.5) есть средняя энергия линейного гармонического осциллятора, вычисленная по теореме классической статистики о равномерном распределении энергии по степеням свободы. Согласно этой теореме на каждую степень свободы в среднем приходится кинетическая энергия $\frac{1}{2} kT$. Для линейного гармонического осциллятора средняя кинетическая энергия равна средней потенциальной энергии, поэтому его средняя энергия равна kT . В условиях термодинамического равновесия между электромагнитным излучением и веществом стенок средняя энергия, приходящаяся на одно колебание поля в полости, также будет равна kT . Она складывается из средних энергий электрического и магнитного полей ($kT/2 + kT/2 = kT$).

В классической физике энергия меняется непрерывно, поэтому среднее значение энергии можно вычислить следующим образом:

$$\bar{E} = \int_0^{\infty} E dW, \quad (1.12)$$

где элементарная вероятность, соответствующая интервалу энергии dE , определяется по формуле Больцмана

$$dW = A e^{-\frac{E}{kT}} dE. \quad (1.13)$$

Учитывая условие нормировки

$$\int_0^{\infty} dW = 1, \quad (1.14)$$

находим нормировочную константу

$$A = \frac{1}{\int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{kT}} dE} . \quad (1.15)$$

Подставляя (1.15) в (1.12) с учётом (1.13), получаем

$$\bar{E} = \frac{\int_0^{\infty} E e^{-\frac{E}{kT}} dE}{\int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{kT}} dE} . \quad (1.16)$$

Вводя новую переменную $x = E/kT$, получим следующее выражение:

$$\bar{E} = \frac{(kT)^2 \int_0^{\infty} x e^{-x} dx}{kT \int_0^{\infty} e^{-x} dx} . \quad (1.17)$$

Интеграл, стоящий в знаменателе, как нетрудно видеть, равен единице. Интеграл в числителе вычисляется по частям, что даёт тоже 1. В результате средняя энергия осциллятора получается равной kT , что соответствует классической теореме о равномерном распределении энергии по степеням свободы:

$$\bar{E} = kT . \quad (1.18)$$

Таким образом, структура формулы Рэлея–Джинса (1.5) следующая:

$$\rho_{\nu} = N_{\nu} \cdot \bar{E} (T) , \quad (1.19)$$

где N_{ν} – число собственных колебаний поля, заключенного в замкнутой полости, а $\bar{E} (T)$ – средняя энергия осциллятора, зависящая только от температуры.

Согласно формуле Рэлея–Джинса спектральная плотность энергии излучения должна монотонно возрастать с увеличением частоты. Однако эксперимент показывал, что с увеличением частоты спектральная плотность сначала растёт, достигает максимума, а затем падает, стремясь к нулю в области больших частот. Кроме того, интегральная плотность энергии излучения

$$u = \int_0^{\infty} \rho_{\nu} d\nu = \frac{8\pi}{c^3} kT \int_0^{\infty} \nu^2 d\nu = \infty ! \quad (1.20)$$

П. Эренфест назвал это «ультрафиолетовой катастрофой». Из (1.20) следует, что практически вся энергия должна перейти к электромагнитному полю, при этом температура стенок полости должна упасть до абсолютного нуля.

«Ультрафиолетовая катастрофа» оказалась камнем преткновения для классической физики, которая обнаружила свою несостоятельность при попытке построения теории равновесного теплового излучения.

Ранее, в 1887 г., московский физик В.А. Михельсон применил методы статистической физики к совокупности элементарных излучателей, образующих нагретое тело. Предположив, что скорости атомов подчиняются распределению Максвелла, Михельсон получил формулу, которая качественно воспроизводила экспериментальную кривую, но не совпадала с ней. Этот статистический подход к проблеме теплового излучения был развит немецким физиком Вильгельмом Вином, который в 1896 г. на основе статистики Максвелла–Больцмана получил следующую формулу:

$$\rho_\nu = a\nu^3 e^{-\frac{b\nu}{T}}, \quad (1.21)$$

где a и b – постоянные. В отличие от формулы Рэлея–Джинса, формула Вина давала максимум для кривой распределения энергии в спектре АЧТ.

В 1900 г. две группы учёных, работавших в то время Берлинском Физико-техническом институте, Отто Люммер и Эрнст Прингсгейм, и независимо Генрих Рубенс и Фердинанд Курльбаум, подвергли тщательной экспериментальной проверке формулу Вина и обнаружили, что она применима только в коротковолновой части спектра (т.е. при больших частотах). По данным Рубенса, величина $\rho(\nu, T)$ оказалась пропорциональной температуре T в области малых частот, о чём он сообщил Максиму Планку, который уже на протяжении ряда лет занимался теоретическими исследованиями вопроса о равновесии между излучением и веществом. Этот экспериментальный факт сыграл важную роль в установлении Планком единой формулы, которая позволила описать весь спектр АЧТ.

3. Гипотеза о квантовании энергии микроскопических систем. Формула Планка

В 1900 г. Планку удалось установить формулу, благодаря которой ему было суждено стать основателем квантовой теории:

$$\rho_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}. \quad (1.22)$$

Эта формула была гениально угадана Планком, он получил её методом «подгонки». Здесь h – новая универсальная константа, введённая Планком и носящая его имя, $h = 6,62 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}$. В системе СИ она соответственно равна $6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$.

Формула Планка (1.22) удовлетворяет принципу соответствия: в области малых частот она совпадает с формулой Рэля–Джинса, а в области больших частот она переходит в формулу Михельсона–Вина.

1) Рассмотрим случай малых частот, когда $\frac{h\nu}{kT} \ll 1$. В этом случае можно применить формулу приближённого вычисления: $e^x \approx 1 + x$ при малых x . Тогда из (1.22) получим

$$\rho_\nu \approx \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{kT} - 1} \approx \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot kT, \quad (1.23)$$

что совпадает с формулой Рэля–Джинса.

2) В области больших частот, когда $\frac{h\nu}{kT} \gg 1$, в знаменателе (1.22) можно пренебречь единицей по сравнению с экспонентой, в этом случае

$$\rho_\nu \approx \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot h\nu \cdot e^{-\frac{h\nu}{kT}} \sim \nu^3 \cdot e^{-\frac{h\nu}{kT}}, \quad (1.24)$$

что совпадает с формулой Михельсона–Вина. При этом становится понятной микроструктура постоянной b , входящей в формулу Вина (1.21). Она связана с фундаментальными константами: $b = h/k$.

Найденную им формулу Планк впервые представил в докладе «Об одном улучшении закона Вина» на заседании Немецкого физического общества в Берлине 19 октября 1900 г. (Речь шла именно об «улучшении» закона Вина, и пока ничто не предвещало коренной ломки установившихся физических представлений). Последующие два месяца он интенсивно размышлял над тем, чтобы придать ей физический смысл. 14 декабря 1900 г. он вновь произнёс доклад на заседании Немецкого физического общества, который назывался «К теории распределения энергии излучения нормального спектра». В нём было представлено обоснование найденной им формулы. Этот день считается днём рождения квантовой теории. Таким образом, Планк сначала нашёл математическую модель закона излучения АЧТ, а затем постарался придать ему физический смысл.

Какие физические допущения должен был сделать Макс Планк, чтобы обосновать выведенную им формулу? Так же, как и при выводе формулы Рэлея–Джинса, стенки замкнутой полости рассматривались как совокупность заряженных линейных гармонических осцилляторов, обменивающихся энергией с электромагнитным полем. Однако, в отличие от классической теории, Планк выдвинул гипотезу о том, что энергия осциллятора меняется не непрерывно, а дискретно. Энергия осциллятора должна быть кратна некоторой минимальной энергии ε , пропорциональной частоте колебаний ν :

$$E = n\varepsilon = nh\nu, \quad (1.25)$$

$n = 0, 1, 2, 3, \dots$ Величина

$$\varepsilon = h\nu \quad (1.26)$$

представляет собой **квант энергии**, т.е. элементарную порцию энергии (рис. 5). Постоянную h , имеющую размерность произведения (энергия \times время), Планк назвал квантом действия. «Таинственный посол из реального мира», – так охарактеризовал эту константу Планк.

В классической физике действие – это непрерывно изменяющаяся физическая величина. Напомним, что она связана с функцией Лагранжа \mathcal{L} (которая есть разность кинетической и потенциальной энергии, и поэтому меняется в классической механике непрерывным образом):

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt .$$

А здесь, благодаря гипотезе Планка, появилась минимальная порция квантового действия.

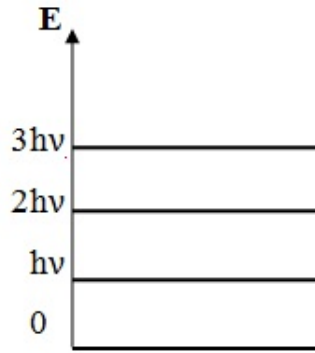


Рис. 5. Квантование энергии осциллятора

Гипотеза Планка противоречила законам классической физики.

- 1) В классической механике Ньютона и электродинамике Максвелла все величины меняются непрерывно и могут принимать сколь угодно малые значения.
- 2) Формула Планка не удовлетворяла классической теореме о равномерном распределении энергии по степеням свободы.

Для вычисления средней энергии осциллятора с учётом гипотезы Планка вместо (1.12) и (1.13) мы должны записать

$$\bar{E} = \sum_0^{\infty} E_n W_n,$$

$$W_n = A e^{-\frac{E_n}{kT}},$$

и в выражении (1.16) непрерывное интегрирование следует заменить дискретной суммой:

$$\bar{E} = \frac{\sum_0^{\infty} n\varepsilon \cdot e^{-\frac{n\varepsilon}{kT}}}{\sum_0^{\infty} e^{-\frac{n\varepsilon}{kT}}} = \frac{\varepsilon(0 + e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} + 2e^{-\frac{2\varepsilon}{kT}} + 3e^{-\frac{3\varepsilon}{kT}} + \dots)}{1 + e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} + e^{-\frac{2\varepsilon}{kT}} + e^{-\frac{3\varepsilon}{kT}} + \dots}$$

Введём обозначение $x = e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}$. Тогда получим для средней энергии

$$\bar{E} = \varepsilon \frac{0 + x + 2x^2 + 3x^3 + \dots}{1 + x + x^2 + x^3 + \dots} = \varepsilon \frac{x(0 + 1 + 2x + 3x^2 + \dots)}{1 + x + x^2 + x^3 + \dots}. \quad (1.27)$$

В знаменателе формулы (1.27) стоит сумма бесконечно убывающей геометрической прогрессии

$$\sigma = \frac{1}{1 - x},$$

а выражение в скобке, содержащееся в числителе, есть производная от этой суммы

$$\frac{d\sigma}{dx} = \frac{1}{(1 - x)^2}.$$

Поэтому средняя энергия осциллятора имеет вид

$$\bar{E} = \frac{\varepsilon x}{1 - x} = \frac{\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon}{kT}} - 1}.$$

После подстановки в это выражение величины кванта энергии (1.26) получается формула Планка для средней энергии осциллятора

$$\boxed{\bar{E} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}}. \quad (1.28)$$

В отличие от классического выражения $\bar{E} = kT$, средняя энергия осциллятора в квантовой теории зависит не только от температуры, но и от частоты. При этом число осцилляторов с данной частотой, так же как и в классическом случае, определяется формулой (1.11), т.е. структура формулы (1.19) осталась прежней, но изменилось выражение для средней энергии осциллятора: она оказывается неодинаковой для различных частот.

Теперь становится понятным, почему формула Рэля–Джинса не согласовывалась с опытом в области высоких частот. При $\frac{h\nu}{kT} \gg 1$ величина кванта энергии $h\nu$ (1.26) становится достаточно большой, и уже нельзя пренебрегать дискретностью порций энергии излучения.

Из формулы Планка (1.22) вытекают законы теплового излучения.

1) Интегральная плотность излучения

$$u = \int_0^{\infty} \rho_{\nu} d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^{\infty} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu. \quad (1.29)$$

Вводя новую переменную $x = \frac{h\nu}{kT}$, получим

$$u = \frac{8\pi}{c^3 h^3} k^4 T^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx.$$

Учитывая, что

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15},$$

получаем следующее выражение:

$$u = \frac{8\pi^5 k^4}{15c^3 h^3} T^4, \quad (1.30)$$

откуда следует, что интегральная излучательная способность АЧТ

$$\varepsilon_T = \int_0^{\infty} \varepsilon(\nu, T) d\nu = \frac{c}{4} u = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^3} T^4 = \sigma T^4, \quad (1.31)$$

что совпадает с законом Стефана–Больцмана, установленным экспериментально Й. Стефаном в 1879 г. и теоретически выведенным Л. Больцманом в 1884 г. Таким образом, интегральная плотность энергии излучения (1.30), вычисленная на основе формулы Планка, оказывается конечной, т.е. «ультрафиолетовая катастрофа» устраняется. Кроме того, формула (1.31) позволяет вскрыть микроструктуру постоянной Стефана–Больцмана, содержащей мировые константы: постоянная Больцмана, скорость света и постоянная Планка.

2) Формула Планка позволяет получить закон смещения Вина (1893 г.):

при возрастании температуры максимум плотности энергии излучения сдвигается в область коротких длин волн

$$\lambda_{max} = \frac{b}{T}, \quad (1.32)$$

где b – постоянная Вина, λ_{max} – длина волны, соответствующая максимуму в распределении энергии по длинам волн.

Для получения этого закона следует формулу Планка записать для длин волн, учитывая соотношение

$$\rho_\nu d\nu = \rho_\lambda d\lambda,$$

связь между длиной волны и частотой электромагнитных волн $\nu = \frac{c}{\lambda}$, а также формулу

$$|d\nu| = \frac{c}{\lambda^2} d\lambda.$$

Тогда распределение энергии по длинам волн будет иметь вид

$$\rho_\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}. \quad (1.33)$$

Используя условие экстремума

$$\frac{dE_\lambda}{d\lambda} = 0,$$

и вводя переменную $x = \frac{\lambda kT}{hc}$, можно получить трансцендентное уравнение

$$\frac{1}{x_m} = 5 \left(1 - e^{-\frac{1}{x_m}} \right).$$

Его решением является

$$\frac{1}{x_m} \approx 5(1 - e^{-5}) \approx 4,97.$$

Поэтому $\lambda_m = \frac{hc}{kT} x_m = \frac{hc}{4,97kT}$, откуда следует формула, совпадающая с законом смещения Вина,

$$\lambda_m T = \frac{hc}{4,97k} = 0,289 \text{ см} \cdot \text{К}.$$

Формула Планка не только позволила полностью описать экспериментально наблюдаемое распределение энергии в спектре АЧТ, её появление означало рождение новой, квантовой, эпохи. «В тот самый день величественное и грандиозное здание классической физики было потрясено до самого основания, хотя никто тогда ещё не отдавал себе ясного отчёта в этом. В истории науки не было

подземных толчков, сравнимых по силе с этим», – писал де Бройль в книге «Революция в физике».

На церемонии вручения Планку Нобелевской премии член Шведской королевской академии наук А.Г. Экстранд отметил, что «теория излучения Планка – самая яркая из путеводных звёзд современного физического исследования, и пройдёт, насколько можно судить, ещё немало времени, прежде чем иссякнут сокровища, которые были добыты его гением».

При построении теории равновесного теплового излучения Планк предполагал, что квантовый характер взаимодействия излучения с веществом обусловлен свойством процесса излучения, но природа самого электромагнитного излучения остаётся непрерывной. Можно провести такую параллель: водичку мы пьём отдельными глотками (квантами), но имеющаяся в стакане (или в бутылке) вода может быть представлена любым количеством жидкости. Тем самым Планк пытался примирить квантовую теорию с волновой теорией излучения. Однако дальнейшее развитие физики показало, что и само электромагнитное поле имеет дискретную природу.

Спустя 5 лет после формулировки своей квантовой гипотезы, Макс Планк писал, что предположение о существовании элементарного кванта электричества «прокладывает мост к существованию энергетического элементарного кванта h , тем более, что h того же порядка, что e^2/c (e – элементарный квант электричества, c – скорость света)». Это было прямым указанием на фундаментальную роль новой константы.



**Макс Планк
(1858–1947)**

Выдающийся немецкий физик-теоретик, основоположник квантовой теории.

Научные труды посвящены термодинамике, теории теплового излучения, квантовой теории, теории относительности, оптике.

Ввёл гипотезу о квантах энергии атомных осцилляторов и постоянную h с размерностью действия.

В 1918 г. удостоен Нобелевской премии за открытие квантов энергии.

Член многих академий наук мира.

С 1929 года Немецкое физическое общество вручает медаль имени Макса Планка за достижения в теоретической физике. Сам Планк стал первым её обладателем.

В 1948 г. научными институтами Германии создано Общество Макса Планка.

Великолепный пианист и увлечённый альпинист.

«Коротко и сжато я могу все дело назвать актом отчаяния (Akt der Verzweiflung). Потому что по природе я миролюбив и не расположен к рискованным приключениям... Теоретическое объяснение должно быть найдено любой ценой и никакая цена не была бы слишком высока».

«Я попытался каким-то способом ввести h в рамки классической теории. Однако, вопреки всем попыткам, эта величина оказалась весьма строптивой... В том или ином месте возникала зияющая трещина... Провал всех попыток перекинуть мост через эту пропасть вскоре не оставил более никаких сомнений в том, что квант действия играет фундаментальную роль в атомной физике, и с его появлением в физической науке наступила новая эпоха, ибо в нём заложено нечто, до того времени неслыханное, что призвано радикально преобразить наше физическое мышление, построенное на понятии непрерывности всех причинных связей с тех самых пор, как Ньютоном и Лейбницем было создано исчисление бесконечно малых».

Лекция 2. Квантовые свойства электромагнитного излучения

1. Гипотеза Эйнштейна о корпускулярно-волновом дуализме электромагнитного излучения. Теория фотонов

1905 год явился годом триумфа научной мысли Альберта Эйнштейна. В этом году он создал три выдающиеся теории: специальную теорию относительности, теорию фотонов и теорию броуновского движения. В статье «Об одной эвристической точке зрения, касающейся возникновения и превращения света», он сформулировал гипотезу световых квантов. Эйнштейн пошёл дальше Планка, распространив идею квантования энергии вещества на электромагнитное поле. Он увидел в идее Планка о квантах энергии не просто удобную «рабочую гипотезу» или «удачный математический приём», а способ вскрыть саму суть света. Эйнштейн предположил, что квантуется не только процесс обмена энергией между излучением и веществом, но и энергия самого электромагнитного поля. Электромагнитное поле имеет квантовую природу. Кванты света впоследствии получили название фотонов (Льюис, 1926 г.).

Базис теории фотонов Эйнштейна составляют два уравнения:

$$\varepsilon = h\nu, \tag{2.1}$$

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \tag{2.2}$$

На первый взгляд, формула (2.1) не содержит ничего нового по сравнению с формулой Планка. Однако это не так. У Планка ν – это частота колебаний осциллятора, в то время как у Эйнштейна ν – это частота самого электромагнитного излучения.

Соотношение (2.2) является новым по сравнению с теорией Планка, оно показывает, что фотон имеет не только энергию, но и импульс. Эта формула получается путём комбинации соотношения (2.1) и формулы для энергии из специальной теории относительности

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2} . \quad (2.3)$$

Учитывая, что для фотонов масса покоя $m_0 = 0$, получаем из (2.3)

$$E = cp , \quad (2.4)$$

откуда с учётом (2.1) получается выражение для импульса фотона.

Замечательной особенностью формул (2.1) и (2.2) является содержащийся в них корпускулярно-волновой дуализм электромагнитного поля: в левой части каждой из них стоят корпускулярные свойства (энергия, импульс), а в правой – волновые (частота и длина волны). В связи с этим возникают следующие вопросы:

1) не является ли теория фотонов Эйнштейна возвратом к представлениям Ньютона о корпускулярной природе света?

2) было ли достаточно оснований у Эйнштейна для создания теории, противоречащей волновой концепции Максвелла?

Ответ на первый вопрос заключается в следующем. Согласно корпускулярной теории Ньютона (1672 г.) свет есть поток частиц (корпускул), движение которых подчиняется законам механики. В том же XVII веке возникла волновая теория Гюйгенса. В начале XIX века, благодаря работам Юнга и Френеля, которые исследовали явления интерференции, дифракции и поляризации света, корпускулярная теория была отвергнута, а волновая теория света стала общепризнанной. Волновая концепция получила блестящее подтверждение в теории Максвелла, из которой следовало, что свет – это электромагнитные волны. К концу XIX века физики были абсолютно убеждены в том, что корпускулярная теория света неверна, а волновая теория является правильной. На протяжении 300 лет эти две концепции соперничали друг с другом. В начале XX столетия эта борьба завершилась созданием теории фотонов, которая явилась синтезом корпускулярных и волновых представлений о природе света: свет имеет двойственную корпускулярно-волновую природу. Свет явился первым объектом, продемонстрировавшим дуализм корпускулярных и волновых свойств.

Ответ на второй вопрос является утвердительным. Указанием на корпускулярный аспект поведения электромагнитных волн явился, в частности,

фотоэффект – явление выбивания электронов из металла под действием света (внешний фотоэффект). Впервые это явление наблюдал Генрих Герц в 1887 г. Он обнаружил, что облучение ультрафиолетовым светом металлического катода разрядника облегчает проскакивание искры между катодом и анодом. Подробнее это явление изучил А.Г. Столетов, который открыл 4 закона фотоэффекта (ещё до открытия электрона!):

- 1) Фотоэффект является мгновенным (безынерционным), т.е. от начала освещения катода до вылета электронов проходит ничтожно малое время (в первоначальных опытах время запаздывания было менее 10^{-4} с, в более поздних экспериментах – менее 10^{-9} с).
- 2) Для каждого металла существует своя «красная» граница фотоэффекта, т.е. определённая длина волны, выше которой фотоэффект не наблюдается.
- 3) Кинетическая энергия вылетающих отрицательно заряженных частиц (электронов, как выяснилось в дальнейших исследованиях Ф. Ленарда и А.Ф. Иоффе) пропорциональна частоте падающего света.
- 4) Наличие фототока насыщения и прямая пропорциональность между силой тока и интенсивностью падающего света показывали, что число фотоэлектронов пропорционально интенсивности света.

Ни один из этих законов не получил объяснения с волновой точки зрения.

1) Согласно теории Максвелла энергия распределяется равномерно по всему фронту электромагнитной волны. Рассматривая электрон как шарик с классическим радиусом $r_e \sim 10^{-13}$ см и площадью поверхности $S_e = 4\pi r_e^2 \sim 10^{-26}$ см², можно сделать заключение о том, что такая ничтожно малая поверхность будет поглощать очень мало энергии. Поэтому для того, чтобы электрон накопил энергию, необходимую для совершения работы выхода из металла (несколько электрон-вольт), потребуется какое-то время.

Например, если электрон находится на расстоянии 1 см от источника мощностью 100 Вт = 100 Дж/с, то на площадь его поверхности каждую секунду придёт энергия, равная 10^{-24} Дж. Полагая, что работа выхода электрона из металла составляет величину порядка 1 эВ, т.е. порядка 10^{-19} Дж, для того чтобы он

покинул металл потребуется почти 28 часов, т.е. больше суток, что не согласуется с экспериментом.

С точки зрения волновой теории совершенно неясно, каким образом у электрона практически мгновенно оказывается необходимая энергия, чтобы покинуть металл. Следовательно, теория Максвелла объясняла процесс распространения электромагнитных волн, но не могла объяснить взаимодействие света с веществом.

2) Фотоэффект наблюдается, если

$$\lambda < \lambda_0, \nu > \nu_0. \quad (2.5)$$

Такая избирательность длины волны совершенно неясна в рамках классической волновой картины.

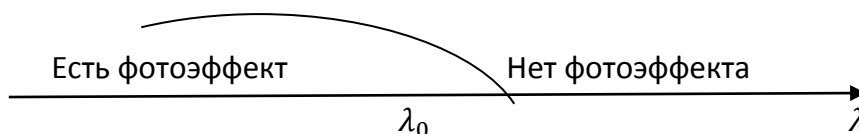


Рис. 6. «Красная» граница фотоэффекта

3) С точки зрения волновой теории света электрическое поле электромагнитной волны ускоряет электроны в материале катода, они начинают «раскачиваться», амплитуда их вынужденных колебаний возрастает пропорционально амплитуде колебаний вектора электрической напряжённости. Сила, действующая на электрон, определяется произведением его заряда e на напряжённость электрического поля световой волны \mathcal{E} . Поэтому приобретаемая электроном скорость согласно второму закону Ньютона будет пропорциональна \mathcal{E} , а кинетическая энергия – пропорциональна \mathcal{E}^2 . Поскольку интенсивность света пропорциональна квадрату амплитуды колебаний напряжённости электрического поля, максимальная скорость фотоэлектронов должна увеличиваться с ростом интенсивности светового потока. А опыт показывал, что кинетическая энергия электронов пропорциональна не силе света, а его частоте, связанной с цветом.

4) Зависимость числа вылетающих электронов от интенсивности света также представлялась непонятной с точки зрения волновой теории света.

Все эти трудности исчезают, если рассматривать свет как поток фотонов. Теория фотонов Эйнштейна позволила объяснить все 4 закона.

1) Если энергия электромагнитной волны распространяется не равномерно, а отдельными порциями (квантами), то энергии одного фотона может оказаться достаточно, чтобы электрон совершил работу выхода и покинул металл. Этим объясняется безынерционность фотоэффекта.

2) Второй закон получает объяснение на основе уравнения Эйнштейна, которое представляет собой закон сохранения энергии применительно к фотоэффекту:

$$h\nu = A + \frac{mv_{max}^2}{2}. \quad (2.6)$$

Согласно этому уравнению энергия фотона расходуется на совершение работы выхода и сообщение электрону кинетической энергии. Учитывая, что $\frac{mv_{max}^2}{2} \geq 0$, фотоэффект может наблюдаться при условии $\frac{hc}{\lambda} \geq A$, откуда следует наличие «красной» границы фотоэффекта

$$\lambda_0 = \frac{hc}{A}. \quad (2.7)$$

3) Третий закон фотоэффекта также получает обоснование на основе уравнения (2.6), из которого непосредственно следует, что кинетическая энергия фотоэлектронов пропорциональна частоте падающего света.

4) Каждый электрон получает энергию у одного фотона, поэтому число выбиваемых электронов должно быть пропорционально числу поглощённых фотонов, т.е. интенсивность J света и число фотоэлектронов связаны соотношением

$$N_{\text{фот}} = \frac{J}{h\nu}. \quad (2.8)$$

Теория фотонов Эйнштейна получила многочисленные экспериментальные подтверждения, важнейшим из которых явился эффект Комптона.



**Альберт Эйнштейн
(1879–1955)**

Выдающийся физик-теоретик. Создатель специальной (1905) и общей теории относительности (1915), теории фотонов, теории броуновского движения (1905). Предсказал явление индуцированного излучения (1916 г.), создал квантовую статистику частиц с целым спином (1924 г.).

С 1933 г. научные работы посвящены космологии и единой теории поля.

Самый знаменитый из учёных XX века. Член ведущих академий наук мира.

С 1932 г. профессор Принстонского университета (США).

Лауреат Нобелевской премии 1921 г. «за заслуги перед теоретической физикой, и особенно за открытие закона фотоэлектрического эффекта».

Активный борец за использование ядерной энергии в мирных целях.

Скрипач, проникновенно исполнявший Баха и Моцарта, поклонник парусного спорта.

«Об одной эвристической точке зрения, касающейся возникновения и превращения света», 1905 г.:

«Согласно теории Максвелла во всех электромагнитных, а значит, и световых, явлениях энергию следует считать величиной, непрерывно распределённой в пространстве, тогда как энергия весомого тела, по современным физическим представлениям, складывается из энергий атомов и электронов. Энергия весомого тела не может быть раздроблена на сколь угодно большое число произвольно малых частей, тогда как энергия пучка света, испущенного точечным источником, по максвелловской (или вообще по любой волновой) теории света, непрерывно распределяется по всё возрастающему объёму.

Я и в самом деле думаю, что опыты, касающиеся «излучения черного тела», фотолюминесценции, возникновения катодных лучей при освещении ультрафиолетовыми лучами и других групп явлений, связанных с возникновением и превращением света, лучше объясняются предположением, что энергия света распределяется по пространству дискретно. Согласно этому сделанному здесь предположению энергия пучка света, вышедшего из некоторой точки, не распределяется равномерно во все возрастающем объеме, а складывается из конечного числа локализованных в пространстве неделимых квантов энергии, поглощаемых или возникающих только целиком».

Из письма Мишелю Бессо, 1951 г.:

«После 50 лет раздумий я так и не смог приблизиться к ответу на вопрос, что же такое световой квант».

Из письма Луи де Бройлю, 1954 г.:

«Я, должно быть, похож на страуса, который все время прячет голову в песок относительности, чтобы не смотреть в лицо гадким квантам».

2. Эффект Комптона

В 1922 г. американский физик Артур Комптон, изучая процесс рассеяния рентгеновских лучей на веществах, состоящих из лёгких атомов (парафин, графит и др.), обнаружил, что в рассеянном излучении наряду с исходной длиной волны λ появляется смещённая линия с большей длиной волны: $\lambda' = \lambda + \Delta\lambda$ (рис. 7). Этот эффект был непонятен с точки зрения классической теории. Под действием поля электромагнитной волны, имеющей частоту ω , электрон начинает совершать вынужденные гармонические колебания с той же частотой. При этом, с какой частотой электрон колеблется, с такой же и излучает электромагнитные волны, и поэтому рассеянное излучение должно быть той же частоты, что и падающая волна.

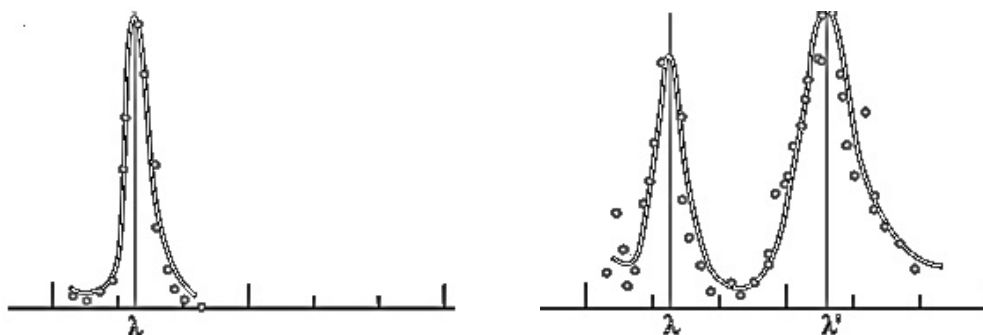


Рис. 7. Спектральное распределение рентгеновских лучей в эффекте Комптона до (слева) и после (справа) рассеяния

При обсуждении этого эффекта электроны можно считать свободными частицами, поскольку энергия рентгеновских лучей в экспериментах Комптона значительно превосходила энергию связи электронов в веществе. Поэтому начальный импульс электрона можно считать равным нулю.

Все особенности комптоновского излучения можно объяснить, исходя из корпускулярной природы электромагнитного излучения, рассматривая столкновение рентгеновского кванта и электрона как упругое соударение двух шаров. Это сделал сам Комптон. За экспериментальное открытие и теоретическое

обоснование эффекта, носящего его имя, Комптон был удостоен Нобелевской премии по физике в 1927 г.

При столкновении с рентгеновским квантом энергия электрона может оказаться достаточно большой, поэтому необходимо использовать формулы специальной теории относительности Эйнштейна. В курсе общей и экспериментальной физики элементарная теория эффекта Комптона рассматривается на основе применения двух законов сохранения: закона сохранения энергии и закона сохранения импульса. Здесь мы рассмотрим теорию, используя один закон сохранения 4-вектора импульса (или вектора энергии-импульса), известный из СТО. Диаграмма эффекта Комптона имеет следующий вид:

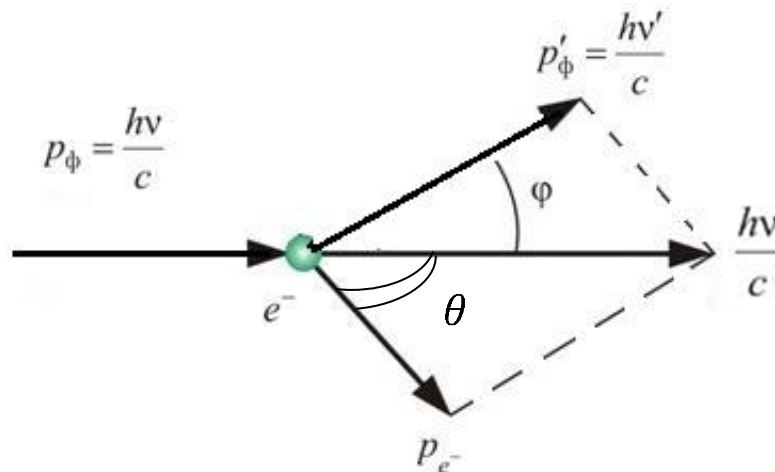


Рис. 8. Векторная диаграмма эффекта Комптона

Параллелограмм на рис. 8 показывает, что импульс падающего фотона $\vec{p}_\phi = \vec{h\nu}/c$ равен сумме импульсов рассеянного фотона $\vec{p}'_\phi = \vec{h\nu'}/c$ и электрона отдачи \vec{p}_e . Угол, на который рассеивается фотон, равен φ . Угол между импульсом электрона отдачи и импульсом первичного фотона обозначен буквой θ . Свяжем систему отсчета со свободным электроном, тогда начальный импульс электрона можно считать равным нулю.

Учитывая определение четырёхмерного вектора импульса

$$p_k \left(\vec{p}; i \frac{E}{c} \right),$$

где $\kappa = 1, 2, 3, 4$, запишем его компоненты сначала для покоящегося электрона и падающего фотона, затем для электрона отдачи и рассеянного фотона:

$p_{k,e} \left(0; i \frac{m_0 c^2}{c} \right)$ $p_{k,\phi} \left(\frac{\vec{h\nu}}{c}; i \frac{h\nu}{c} \right)$	$p'_{k,e} \left(\vec{p}; i \frac{mc^2}{c} \right)$ $p'_{k,\phi} \left(\frac{\vec{h\nu}'}{c}; i \frac{h\nu'}{c} \right).$	(2.9)
--	--	-------

Согласно закону сохранения 4-вектора импульса

$$p_{k,e} + p_{k,\phi} = p'_{k,e} + p'_{k,\phi}. \quad (2.10)$$

Переносим в левую часть $p'_{k,\phi}$ и возводя в квадрат обе части получившегося выражения, будем иметь

$$(p_{k,e} + p_{k,\phi} - p'_{k,\phi})^2 = (p'_{k,e})^2. \quad (2.11)$$

Запишем подробно это выражение:

$$p_{k,e}^2 + p_{k,\phi}^2 + p'_{k,\phi}{}^2 + 2p_{k,e}p_{k,\phi} - 2p_{k,e}p'_{k,\phi} - 2p_{k,\phi}p'_{k,\phi} = (p'_{k,e})^2. \quad (2.12)$$

Из СТО известно, что квадрат 4-вектора является инвариантом

$$p_k^2 = -m_0^2 c^2 = \text{invar}. \quad (2.13)$$

Поэтому $p_{k,e}^2 = (p'_{k,e})^2$, так что эти члены в (2.12) можно сократить. Учитывая, что масса покоя фотона равна нулю ($m_{0,\text{фот}} = 0$), согласно (2.13) $p_{k,\phi}^2 = p'_{k,\phi}{}^2 = 0$. Оставшиеся в (2.12) члены с учётом выражений (2.9) дают

$$2 \left(i m_0 c \cdot i \frac{h\nu}{c} \right) - 2 \left(i m_0 c \cdot i \frac{h\nu'}{c} \right) - 2 \frac{h\nu}{c} \cdot \frac{h\nu'}{c} \cos \varphi - 2i \frac{h\nu}{c} \cdot i \frac{h\nu'}{c} = 0,$$

или

$$m_0(v' - v) + \frac{hvv'}{c^2}(1 - \cos \varphi) = 0.$$

Отсюда вытекает формула для изменённой частоты

$$v' = \frac{v}{1 + \frac{hv}{m_0c^2}(1 - \cos \varphi)} = \frac{v}{1 + 2 \frac{hv}{m_0c^2} \sin^2 \frac{\varphi}{2}}. \quad (2.14)$$

Принимая во внимание связь между частотой и длиной волны $v = c/\lambda$, получаем формулу для изменения длины волны в эффекте Комптона

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2 \frac{h}{m_0c} \sin^2 \frac{\varphi}{2}. \quad (2.15)$$

Величина h/m_0c называется комptonовской длиной волны:

$$\Lambda = \frac{h}{m_0c}. \quad (2.16)$$

Подставляя в эту формулу постоянную Планка, массу электрона и скорость света в гауссовой системе единиц, получим

$$\Lambda = \frac{6.62 \cdot 10^{-27}}{9 \cdot 10^{-28} \cdot 3 \cdot 10^{10}} = 0.024 \text{ \AA} \sim 2 \cdot 10^{-10} \text{ см.}$$

Таким образом, эффект «покраснения» фотона описывается следующей формулой

$$\Delta\lambda = 2\Lambda \cdot \sin^2 \frac{\varphi}{2}. \quad (2.17)$$

Определим изменение кинетической энергии электрона при рассеянии рентгеновского кванта. В соответствии с законом сохранения энергии это изменение должно быть равно разности энергии фотона до рассеяния и после рассеяния

$$E_e = h\nu - h\nu' = h(\nu - \nu') = h\Delta\nu = h\nu \frac{\Delta\lambda}{\lambda + \Delta\lambda}.$$

С учётом (2.17) получаем

$$E_e = h\nu \frac{2\Lambda \cdot \sin^2 \frac{\varphi}{2}}{\lambda + 2\Lambda \cdot \sin^2 \frac{\varphi}{2}}. \quad (2.18)$$

Для $\lambda = \Lambda = 0,024 \text{ \AA}$ (γ – излучение) и $\varphi = 90^\circ$ энергия электрона отдачи составит половину энергии падающего фотона.

Согласно (2.14) энергия рассеянного фотона

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + 2 \frac{h\nu}{m_0 c^2} \sin^2 \frac{\varphi}{2}} = \frac{h\nu}{1 + 2 \frac{\Lambda}{\lambda} \cdot \sin^2 \frac{\varphi}{2}}. \quad (2.19)$$

В случае $\lambda = \Lambda$ из (2.18) и (2.19) можно получить следующие отношения энергий «электрона отдачи» и рассеянного фотона к энергии первичного фотона

$$\frac{E_e}{h\nu} = \frac{2\sin^2 \frac{\varphi}{2}}{1 + 2\sin^2 \frac{\varphi}{2}}, \quad (2.20)$$

$$\frac{h\nu'}{h\nu} = \frac{1}{1 + 2 \cdot \sin^2 \frac{\varphi}{2}}. \quad (2.21)$$

Угол φ , на который рассеивается фотон, и угол θ , определяющий направление движения электрона отдачи, связаны соотношением, вытекающим из геометрических соображений (рис. 8):

$$\operatorname{tg} \theta = -\frac{\operatorname{ctg} \frac{\varphi}{2}}{1 + \frac{\Lambda}{\lambda}}. \quad (2.22)$$

В случае, когда $\lambda = \Lambda$, из (2.22) вытекает следующая формула, определяющая направление вылета электрона отдачи

$$\operatorname{tg} \theta = -\frac{\operatorname{ctg} \frac{\varphi}{2}}{2}. \quad (2.23)$$

Формулы (2.20), (2.21) и (2.23) позволяют построить полярную диаграмму эффекта Комптона (рис. 9), показывающую соотношение направлений и энергий рассеянных фотонов и электронов отдачи.

Из диаграммы видно, что электроны отдачи выбрасываются преимущественно вперёд, по направлению движения исходного фотона. Появление электронов отдачи при рассеянии рентгеновских лучей экспериментально подтверждено в опытах с камерой Вильсона.

Эффект Комптона не только подтвердил корпускулярный характер электромагнитного излучения, но и доказал справедливость законов сохранения энергии и импульса в микромире.

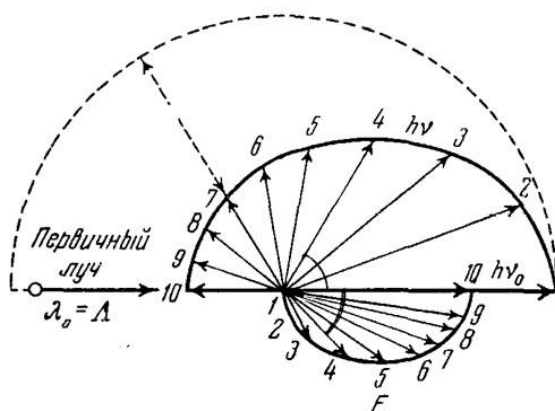


Рис. 9. Полярная диаграмма эффекта Комптона

Комптовская длина волны h/m_0c имеет фундаментальное значение в релятивистской теории электрона. Измеряя смещение длины волны $\Delta\lambda$ (2.17), можно определить постоянную Планка. Таким образом, эффект Комптона даёт один из возможных методов нахождения h .

Лекция 3. Дискретность атомных состояний

1. Модель упруго связанного электрона

Первую модель атома предложил Джозеф Джон Томсон в 1902 г. В 1897 г. он открыл электрон и затем предположил, что электроны входят в состав атома. Согласно модели Томсона атом представляет собой шар радиусом порядка 10^{-8} см, равномерно заряженный по объёму положительным зарядом, а электроны вкраплены в него подобно изюминкам в булке. В целом атом электрически нейтрален. Такая модель получила название «пудинг с изюмом» (рис. 10).

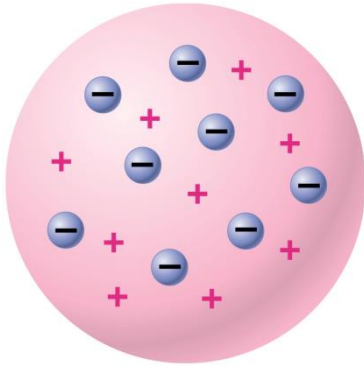


Рис. 10. Модель атома Томсона

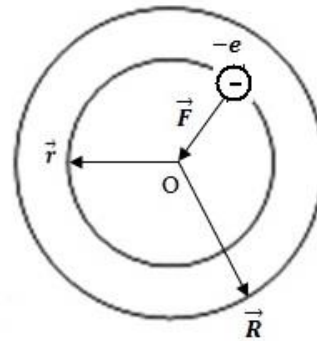


Рис. 11. На электрон действует квазиупругая сила \vec{F}

Рассмотрим сферу радиуса R , равномерно заряженную с объемной плотностью $+\rho$. На расстоянии r от центра находится электрон с зарядом $-e$ (рис. 11). Разделим весь объем сферы на тонкие concentric шаровые слои. Напряжённость электрического поля внутри каждого такого слоя равна нулю, а снаружи поле ведёт себя так, как если бы весь электрический заряд слоя был сосредоточен в центре сферы. Заряд, заключённый в пределах сферы радиуса r , равен

$$q(r) = \frac{4}{3}\pi r^3 \rho.$$

Поэтому электрон испытывает действие силы со стороны этого заряда, которая в соответствии с законом Кулона имеет вид

$$F = \frac{-eq}{r^2} = -\frac{4}{3}e\pi r = -kr. \quad (3.1)$$

Сила, определяемая выражением (3.1), является квазиупругой (её зависимость от расстояния такая же линейная, как и в законе Гука, k – коэффициент упругости), поэтому модель атома Томсона называется моделью упруго связанного электрона.

Уравнение движения электрона в одномерном случае имеет вид

$$m\ddot{x} = -kx, \quad (3.2)$$

или

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0.$$

Это дифференциальное уравнение гармонических колебаний с частотой

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (3.3)$$

Таким образом, под действием возвращающей квазиупругой силы электрон будет вести себя как линейный гармонический осциллятор. Он будет совершать гармонические колебания относительно положения равновесия, совпадающего с центром атома, с собственной частотой

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} = \sqrt{\frac{e^2}{mR^3}} = \sqrt{\frac{(4.8 \cdot 10^{-10})^2}{9.1 \cdot 10^{-28} \cdot (10^{-8})^3}} \approx 10^{16} \frac{1}{c},$$

что соответствует частоте видимого света.

Электрон, движущийся с ускорением, должен излучать электромагнитные волны. Потеря энергии на излучение эквивалентна действию на электрон силы радиационного (или лучистого) трения, которая зависит от скорости изменения ускорения. В механике Ньютона такой силы не было. С учётом силы лучистого трения уравнение движения электрона имеет вид

$$m\ddot{x} = -kx + \frac{2e^2}{3c^3}\ddot{x}. \quad (3.4)$$

Его решением являются затухающие колебания

$$x = x_0 e^{-\frac{\gamma}{2}t} e^{i\omega_0 t}, \quad (3.5)$$

где коэффициент затухания $\gamma = \frac{2e^2\omega^2}{3c^3m} \sim 10^9$. Характерное время, за которое амплитуда колебаний уменьшится в e раз, будет $\tau = \frac{2}{\gamma}$, т.е. $\tau \sim 10^{-9}$ секунд, что соответствует времени жизни атома в возбужденном состоянии.

Однако природа положительно заряженной «жидкости», в которой «плавали» электроны, осталась невыясненной. На смену модели Томсона должны были прийти другие представления о строении атома.

2. Планетарная модель атома. Постулаты Бора

Модель Томсона была опровергнута экспериментами Э. Резерфорда и его сотрудников – Х. Гейгера и Э. Марсдена. Изучая рассеяние α -частиц тонкой золотой фольгой, они обнаружили, что большинство частиц, пролетая через фольгу, отклонялось на малые углы, но примерно одна из 8000 частиц отбрасывалась назад. Резерфорд предположил, что столь сильные отклонения можно объяснить, если допустить, что в центре атома находится маленькое, но тяжелое положительно заряженное ядро (вся масса атома практически сосредоточена в нём), а вокруг него, на периферии, вращаются электроны. Эта модель напоминает устройство Солнечной системы, только роль Солнца теперь играет атомное ядро, а электроны движутся подобно планетам вокруг Солнца. Обе силы – гравитационного и кулоновского притяжения убывают с расстоянием по закону обратных квадратов. Таким образом, анализ углового распределения рассеянных α -частиц позволил Резерфорду в 1911 г. сформулировать планетарную модель атома (рис. 12), которая пришла на смену модели Томсона.

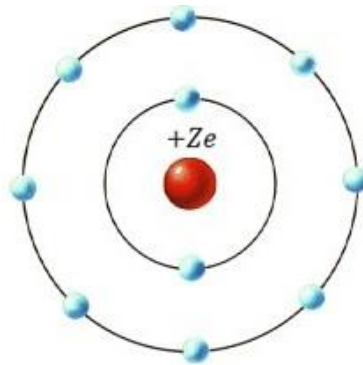


Рис. 12. Планетарная модель атома

Однако такая модель противоречила законам классической электродинамики. Электрон, вращающийся вокруг ядра с центростремительным ускорением, должен был бы терять энергию на излучение в соответствии с формулой, вытекающей из теории Максвелла

$$\mathcal{J} = \frac{2e^2}{3c^3} a^2, \quad (3.6)$$

где \mathcal{J} – мощность излучения осциллятора, a – ускорение электрона. Практически за ничтожно малое время (порядка 10^{-8} с) электрон растратит всю свою энергию на излучение и упадёт на ядро, атом перестанет существовать.

Резерфорд понимал эту трудность предложенной им модели и поэтому в первой же статье предупреждает: «Вопрос об устойчивости атома на этой стадии не следует подвергать рассмотрению».

«Обречённый» атом спас Нильс Бор. В 1913 г. он сформулировал два постулата.

I. Постулат стационарных состояний.

В атомах и атомных системах существуют стационарные состояния, энергия которых образует дискретный ряд

$$E_1, E_2, \dots, E_n. \quad (3.7)$$

В этих состояниях атом не обменивается энергией с электромагнитным полем, несмотря на ускоренное движение электрона.

II. Постулат частот.

При переходе из одного стационарного состояния в другое электрон излучает или поглощает квант энергии, величина которого определяется равенством

$$\boxed{h\nu_{mn} = E_m - E_n}. \quad (3.8)$$

Оба постулата находятся в резком противоречии с классической механикой и электродинамикой. Классическая механика разрешает непрерывную последовательность орбит; выделение из них избранных орбит, удовлетворяющих условию (3.7), не может быть объяснено в её рамках. Когда атом поглощает фотон, электрон мгновенно поднимается на более высокую орбиту, совершая квантовый скачок. Возможность устойчивого движения электрона по круговым орбитам с ускорением, но без излучения энергии запрещена в электродинамике Максвелла.

Дискретность атомных состояний была экспериментально подтверждена в 1913 г. опытами Д. Франка и Г. Герца.

Второй постулат Бора приводит к объяснению закономерностей в спектре атома водорода. В 1885 г. (в год рождения Н. Бора) Иоганн Бальмер установил, что длины волн в видимой части спектра атомарного водорода подчиняются эмпирической формуле

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right), m = 3, 4, 5, \dots; \quad (3.9)$$

R – постоянная Ридберга–Ритца. На протяжении почти трёх десятилетий никто не понимал, почему эта формула «работает». Физики накопили огромные коллекции атомных спектров, но механизм, стоящий за этими закономерностями, оставался неясным. Эйнштейн, посмеиваясь, называл это «спектроскопической зоологией». Для Бора формула Бальмера явилась «ключом» для понимания механизма возникновения спектральных линий. «Как только я увидел формулу Бальмера, мне всё сразу же стало ясно», – рассказывал позднее он Леону Розенфельду о своей догадке.

Согласно второму постулату

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = \frac{E_m}{hc} - \frac{E_n}{hc}.$$

Из сравнения с формулой Бальмера следует, что $\frac{E_m}{hc} = -\frac{R}{m^2}$, поэтому

$$E_m = -\frac{Rch}{m^2}, E_n = -\frac{Rch}{n^2}. \quad (3.10)$$

Это позволило Бору обобщить формулу Бальмера:

$$\boxed{\frac{1}{\lambda_{mn}} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)}, \quad (3.11)$$

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots; m = n + 1, n + 2, n + 3 \dots$$

Обобщённая формула Бальмера (3.11) описывает все серии атомарного водорода (рис. 13). При $n = 1$ в ультрафиолетовом диапазоне наблюдается серия Лаймана, соответствующая переходам электрона с возбуждённых энергетических уровней на основной уровень. При $n = 2$ (оптический диапазон) возникает серия Бальмера. Спектральные линии серии Бальмера обозначаются следующим образом: H_α ($n = 3$), H_β ($n = 4$), H_γ ($n = 5$) и т.д. В инфракрасной области спектра существуют три серии: Пашена ($n = 3$), Брэкетта ($n = 4$), Пфунда ($n = 5$). В далёком инфракрасном диапазоне наблюдается серия Хэмпфри, соответствующая переходам электрона с возбуждённых уровней на шестой уровень ($n = 6$). Т.е. формула Бора позволяла вычислять длину волны для каждого квантового перехода между двумя любыми орбитами.

Формулу (3.11) можно представить в виде разности двух величин

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = T_n - T_m, \quad (3.12)$$

которые называются спектральными термами. В спектроскопии величину термов принято указывать в волновых числах. Спектроскопическая частота (волновое число) равна обычной частоте, деленной на скорость света c :

$$\nu_{\text{спектр.}} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}. \quad (3.13)$$

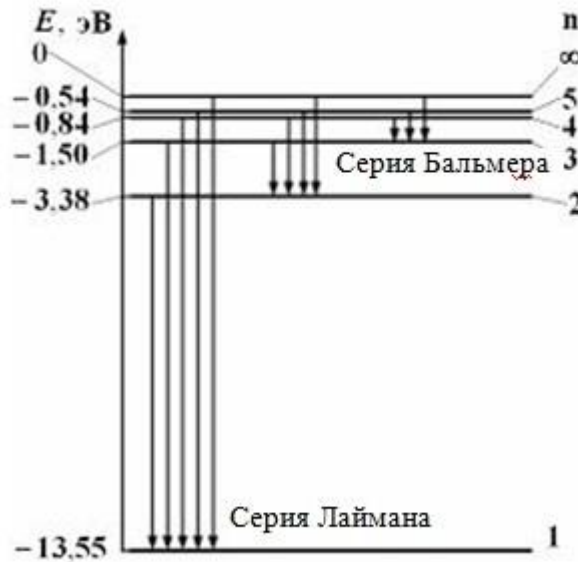


Рис. 13. Диаграмма уровней энергии в атоме водорода

Поэтому формула (3.12) определяет частоту излучения. Такая возможность представления частоты излучения в виде разности двух термов является следствием комбинационного принципа Ритца, установленного эмпирическим путем в 1908 г. Согласно этому принципу, если известны частоты двух спектральных линий одной и той же серии, то их разность будет частотой некоторой третьей спектральной линии. Например, составим разность обратных длин волн двух спектральных линий одной и той же серии, например, для серии Лаймана:

$$\frac{1}{\lambda_{21}} = T_1 - T_2, \frac{1}{\lambda_{31}} = T_1 - T_3, \frac{1}{\lambda_{31}} - \frac{1}{\lambda_{21}} = T_2 - T_3 = \frac{1}{\lambda_{32}},$$

т.е. получается обратная длина волны первой линии серии Бальмера.

В общем случае имеем

$$\nu_{mn} = T_n - T_m, \nu_{kn} = T_n - T_k, \nu_{mn} - \nu_{kn} = T_k - T_m = \nu_{mk}. \quad (3.14)$$

Объяснение закономерностей в атомных спектрах привело к пониманию, что теория атома связана с теорией квантов излучения, т.е. атомная физика является физикой квантовой.

К двум постулатам Бор добавил правило квантования круговых орбит: стационарные орбиты отличаются от всех возможных орбит тем, что на этих орбитах момент импульса квантуется:

$$\boxed{rmv = n\hbar}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.15)$$

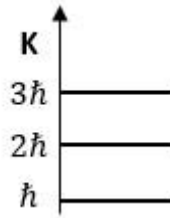


Рис. 14. Квантование момента импульса

Т.е. орбитальный момент (момент количества движения) электрона $K = rmv$ равен целому кратному постоянной Планка \hbar (рис. 14).

Здесь Бор сделал шаг вперед по сравнению с Планком и Эйнштейном. Планк проквантовал энергию, Эйнштейн – импульс, а Бор – момент импульса. Он гениально угадал правило отбора стационарных орбит. Но некоторые указания на это вытекали из постулата Планка о квантовании энергии осциллятора

$$E_n = nh\nu. \quad (3.16)$$

По теореме Эйлера, известной в классической механике,

$$v = \omega r = 2\pi\nu r,$$

откуда следует, что $r = v/2\pi\nu$. Подставляя это выражение в (3.15), получаем

$$mv^2 = nh\nu.$$

В левой части этой формулы стоит удвоенная кинетическая энергия. А правая часть совпадает с квантованной энергией осциллятора (3.16). Удвоение энергии можно объяснить, рассматривая независимо два осциллятора, соответствующие колебаниям вдоль осей x и y .

Введение правила квантования круговых орбит сыграло решающую роль при построении теории атома.

3. Теория водородоподобного атома по Бору

Исходным пунктом для теории Бора явилась планетарная модель атома, предложенная Резерфордом. Рассмотрим водородоподобный атом, т.е. систему, состоящую из ядра с зарядом $+Ze$ и одного электрона (рис. 15).

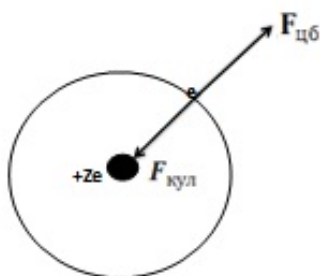


Рис. 15. Водородоподобный атом

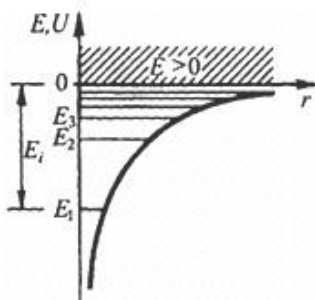


Рис. 16. Полная и потенциальная энергия электрона

Базис теории водородоподобного атома составляет синтез двух классических уравнений с правилом квантования круговых орбит. Первое уравнение описывает классическое условие устойчивости орбиты электрона – равенство силы кулоновского притяжения к ядру и центробежной силы инерции. Второе уравнение представляет собой полную энергию электрона в атоме (сумму кинетической и потенциальной энергии). Третье уравнение представляет собой

дополнительное условие, определяющее стационарные орбиты. Эти три уравнения имеют вид:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}, \quad (\text{I})$$

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r}, \quad (\text{II})$$

$$rmv = n\hbar. \quad (\text{III})$$

Путём деления первого уравнения на третье, получается выражение для скорости электрона на n -й боровской орбите:

$$v_n = \frac{Ze^2}{n\hbar}. \quad (3.17)$$

При этом скорость на любой n -й орбите связана со скоростью на первой орбите соотношением

$$v_n = \frac{v_1}{n}. \quad (3.18)$$

При $Z = 1$, $n = 1$ из (3.17) следует формула для скорости электрона на первой орбите в атоме водорода

$$v_{1H} = \frac{e^2}{\hbar}. \quad (3.19)$$

Отношение

$$\frac{v_{1H}}{c} = \frac{e^2}{\hbar c} = \alpha = \frac{1}{137} \quad (3.20)$$

называется постоянной тонкой структуры. Она введена в 1916 г. Арнольдом Зоммерфельдом для описания тонкой структуры энергетического спектра с учётом релятивистских поправок в теории Бора. Из (3.20) следует, что скорость электрона на первой боровской орбите на два порядка меньше скорости света: $v_{1H} \sim 10^8 \text{ см/с}$. Из этой же формулы вытекает предсказание о максимально возможном заряде ядра и, соответственно, о числе химических элементов в таблице Менделеева в рамках теории Бора. Учитывая, что согласно СТО $v \leq c$, из (3.20) следует, что $Z_{\text{max}} \sim 137$.

Из (3.17) и условия (III) получаем формулу для радиуса стационарных орбит

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{mZe^2}. \quad (3.21)$$

При этом радиус n -й стационарной орбиты связан с радиусом первой орбиты соотношением

$$r_n = n^2 r_1. \quad (3.22)$$

В основном, невозбуждённом, состоянии атома водорода ($n = 1$)

$$r_{1H} = a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.53 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 0,53 \text{ \AA}. \quad (3.23)$$

Эта величина называется радиусом первой боровской орбиты (или боровским радиусом).

Таким образом, типичные размеры атома водорода составляют величину порядка 1 \AA . Это относится к атому, в котором электрон находится в основном или в одном из первых возбуждённых состояний. Однако в результате внешнего воздействия (например, резонансного облучения лазером) электрон можно перевести в высоковозбуждённые состояния ($n \sim 1000$), при которых атом может достигать размера, в 10^6 раз превосходящего размер атома, находящегося в основном состоянии. Атом, находящийся в таких высоковозбуждённых состояниях, называется ридберговским атомом. Например, в космическом пространстве регистрируются атомы, у которых $n \sim 100$.

Подстановка (3.17) и (3.21) в уравнение (II) приводит к формуле, определяющей энергетический спектр водородоподобного атома:

$$E_n = - \frac{mZ^2 e^4}{2n^2 \hbar^2}. \quad (3.24)$$

Таким образом, квантовое число n определяет уровни энергии, радиусы стационарных круговых орбит и скорость электрона на этих орбитах.

Зависимость энергии от n

$$E_n = -\frac{const}{n^2} \quad (3.25)$$

представлена на рис. 16. Здесь же показан ход потенциальной энергии электрона в зависимости от расстояния до ядра

$$U = -\frac{Ze^2}{r}.$$

Квантование энергии имеет место при $E < 0$. Энергия, необходимая для отрыва электрона, находящегося в основном состоянии ($n = 1$), от ядра, т.е. для перевода электрона на уровень с $n = \infty$, есть энергия ионизации (для водорода $E_i = 13.6$ эВ). Энергетический спектр свободного электрона (при $E > 0$) является непрерывным.

Из сопоставления (3.24) с (3.10) следует

$$\frac{2\pi^2 m Z^2 e^4}{n^2 h^2} = \frac{Rch}{n^2}.$$

Отсюда получается выражение для постоянной Ридберга–Ритца

$$R = \frac{mZ^2 e^4}{4\pi\hbar^3 c}. \quad (3.26)$$

Полагая $Z = 1$, получаем постоянную Ридберга для водорода

$$R_H = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c}. \quad (3.27)$$

Таким образом, постоянная Ридберга–Ритца впервые была теоретически вычислена в теории Бора, которая связала эмпирически найденное значение R с постоянной Планка.

Согласно (3.27) теоретическое значение

$$R_{H, \text{теор}} = 109737,303 \text{ см}^{-1},$$

а эмпирическое значение составляет

$$R_{H, \text{эксперим}} = 109677,581 \text{ см}^{-1}.$$

Получение формулы Бальмера с постоянной Ридберга, совпадающей с экспериментом, явилось большим успехом теории Бора.

Более корректное выражение для R получается с учётом конечной величины массы ядра (отношение массы ядра водорода к массе электрона равно $M_H/m = 1836,1$). Точное решение задачи двух тел требует введения вместо массы электрона приведённой массы электрона и ядра. При этом для водорода

$$R_H = \frac{R_\infty}{1 + m/M_H}, \quad (3.28)$$

где R_∞ совпадает с (3.27).

Среди других успехов теории Бора можно отметить объяснение серии Пикеринга для ионизованного гелия, открытие тяжёлого изотопа водорода – дейтерия на основе зависимости постоянной Ридберга от массы ядра.

Это был первый «квантовый портрет» атома.

4. Квантование атома по Бору–Зоммерфельду

В 1916 г. А. Зоммерфельд обобщил теорию Бора на случай эллиптических орбит, т.е. распространил общее решение задачи Кеплера о движении планет вокруг Солнца на атом. В одном из фокусов эллипса (F) находится атомное ядро.

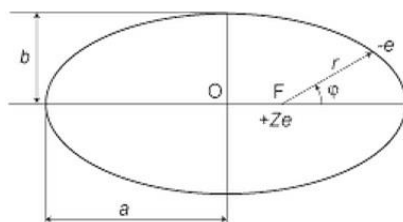


Рис. 17. Движение электрона по эллипсу

Для кулоновского поля, когда потенциальная энергия электрона имеет вид $U = -\frac{Ze^2}{r}$, классическая механика приводит к следующим выражениям для полной энергии электрона

$$E = -\frac{Ze^2}{2a}, \quad (3.29)$$

$$E = -\frac{mZ^2e^4(1-\varepsilon^2)}{2K^2}. \quad (3.30)$$

Первое из них показывает, что всем орбитам с одинаковой большой полуосью a соответствует одна и та же энергия. Второе устанавливает связь энергии с эксцентриситетом орбиты ε . Из этого непрерывного множества орбит следует отобрать дискретный ряд значений с помощью дополнительных квантовых условий.

В случае эллиптических орбит нужны правила квантования для системы с двумя степенями свободы. В качестве обобщённых координат выбираются полярный угол φ и расстояние r электрона от начала координат, совпадающего с положением ядра. С учётом двух независимых координат накладываются два квантовых условия:

$$\oint p_r dr = n_r h, \quad (3.31)$$

$$\oint p_\varphi d\varphi = n_\varphi h, \quad (3.32)$$

где $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$ – радиальное квантовое число, $n_\varphi = 1, 2, 3, \dots$ – азимутальное (угловое) квантовое число.

Обобщённые импульсы в полярной системе координат имеют вид

$$p_r = m\dot{r}, \quad p_\varphi = mr^2\dot{\varphi}, \quad (3.33)$$

т.е. радиальный импульс p_r имеет размерность обычного импульса, а азимутальный p_φ – размерность момента импульса K .

С учётом закона сохранения момента импульса $P_\varphi = mr^2\dot{\varphi} = const$ из (3.32) следует

$$n_\varphi h = \oint p_\varphi d\varphi = p_\varphi \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi p_\varphi, \quad (3.34)$$

откуда получается правило квантования момента импульса

$$K = p_\varphi = n_\varphi \frac{h}{2\pi} = n_\varphi \hbar . \quad (3.35)$$

Применение квантового условия (3.31) приводит к связи эксцентриситета орбиты ε с квантовыми числами n_r и n_φ

$$1 - \varepsilon^2 = \frac{n_\varphi^2}{(n_r + n_\varphi)^2} . \quad (3.36)$$

Сумма квантовых чисел n_r и n_φ называется главным квантовым числом

$$n_r + n_\varphi = n . \quad (3.37)$$

Из (3.30) с учётом (3.35) и (3.36) получается энергетический спектр

$$E_n = - \frac{mZ^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} , \quad (3.38)$$

который совпадает с (3.24) для круговых орбит. При этом эллипсы с одной и той же большой полуосью соответствуют одному и тому же значению главного квантового числа n

$$a = \frac{n^2 \hbar^2}{mZ e^2} . \quad (3.39)$$

Т.е. всего при данной энергии будет n эллипсов с разной величиной эксцентриситета (или степени вытянутости), поскольку малая полуось $b = a\sqrt{1 - \varepsilon^2}$ зависит как от главного, так и от азимутального квантового числа

$$b = n n_\varphi \frac{\hbar^2}{mZ e^2} . \quad (3.40)$$

Для учёта пространственной ориентации орбиты нужны три степени свободы: радиус-вектор, определяющий положение электрона относительно ядра (r), полярный угол θ и азимутальный угол φ . При этом по аналогии с плоской задачей полная энергия имеет вид (3.38) и зависит от суммы трёх квантовых чисел

$$n = n_r + n_\theta + n_\varphi . \quad (3.41)$$

Все эллипсы с одинаковой большой полуосью, различным образом ориентированные в пространстве, имеют одинаковую энергию.

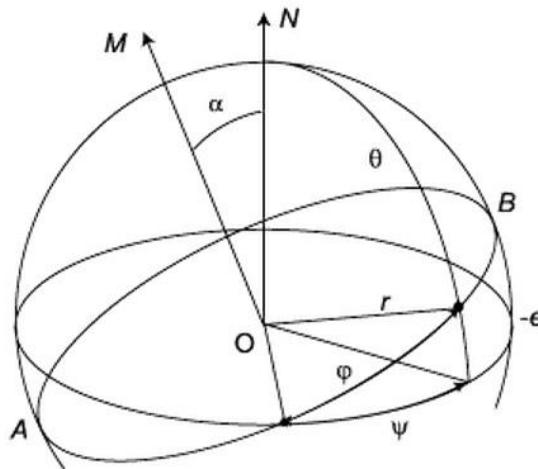


Рис. 18. Пространственная ориентация электронной орбиты

В релятивистском случае теория Зоммерфельда предсказывает расщепление каждого уровня Бора на n дополнительных уровней, обусловленное конечностью скорости света (согласно II постулату СТО):

$$E = m_0c^2 - \frac{m_0Z^2e^4}{2n^2\hbar^2} - \frac{m_0c^2Z^4\alpha^4}{2n^4} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{n_\phi} \right). \quad (3.42)$$

Эффект, предсказанный Зоммерфельдом, называется тонкой структурой спектра. Входящая в релятивистскую поправку постоянная тонкой структуры $\alpha = e^2/\hbar c$ соединила в себе универсальные константы, которые характеризуют дискретность электрического заряда (e), теорию квантов (\hbar) и теорию относительности (c).

5. Затруднения теории Бора. Принцип соответствия

Теория Бора явилась исторически первой квантовой теорией атома. Наряду с крупными успехами в ней содержались существенные недостатки.

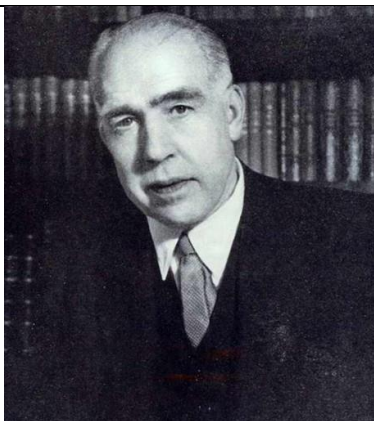
1. Неполная квантовая последовательность теории. В её основу были положены два классических уравнения, дополненные условием квантования. Как в шутку заметил В. Брэгг, теория Бора предлагала физикам в понедельник, среду и пятницу использовать классические законы, а во вторник, четверг и субботу – квантовые.
2. Оставалась неясной природа квантовых скачков, предписываемых электрону вторым постулатом Бора. В чём состоит этот квантовый скачок, в результате которого электрон исчезает на одной орбите и мгновенно появляется на другой? Можно ли вычислить, когда произойдёт этот скачок?
3. Теория Бора хорошо описывала только одноэлектронные атомы. Попытки построить теорию атома гелия, имеющего два электрона, окончились неудачей.
4. Теория Бора предсказывала частоты спектральных линий, но ничего не говорила об их интенсивности. Для вычисления интенсивностей Бор воспользовался сформулированным им принципом соответствия (1922 г.). Согласно этому принципу новая, неклассическая, физическая теория должна в частном предельном случае переходить в старую, классическую, теорию. Т.е. новая теория не отрицает старую, а содержит её в себе в качестве частного предельного случая. Это утверждение является преломлением в физике общепризнанного принципа о соотношении абсолютной и относительной истины.

Бор обратил внимание на то, что в области больших квантовых чисел ($n \gg 1$) энергетический спектр атома становится квазинепрерывным (практически сплошным). В этой области квантовая механика должна переходить в классическую физику. В частности, должна быть справедлива теория Максвелла, согласно которой интенсивность излучения осциллятора определяется формулой (3.6):

$$J = \frac{2e^2}{3c^3} \ddot{x}^2 = \frac{2e^2}{3c^3} \omega^4 x^2.$$

Бор предсказал, какой вид должна иметь эта формула в квантовой области:

$$J_{\text{кв}} = \frac{2e^2}{3c^3} \omega_{mn}^4 |x_{mn}|^2. \quad (3.43)$$



**Нильс Бор
(1885–1962)**

Выдающийся датский физик-теоретик.

Создал первую квантовую теорию атома (1913).

Теоретически обосновал Периодическую систему химических элементов Д.И. Менделеева (1922).

Сформулировал два фундаментальных принципа: принцип соответствия (1922) и принцип дополнительности (1927).

Разработал теорию составного ядра и капельную модель ядра (1936), построил теорию деления атомных ядер (1939).

Основал Институт теоретической физики в Копенгагене. Президент Датской королевской академии наук, член более 20 академий наук мира. Награждён Нобелевской премией в 1922 г. «за заслуги в исследовании строения атомов и испускаемого ими излучения». Крупный философ.

А. Эйнштейн, 1949 г.:

«Все мои попытки приспособить теоретические основы физики к новым результатам потерпели полную неудачу. Это было так, точно из-под ног ушла земля и нигде не видно было твердой почвы, на которой можно было бы строить. Мне всегда казалось чудом, что этой колеблющейся и полной противоречий основы оказалось достаточно, чтобы позволить Бору — человеку с гениальной интуицией и тонким чутьем — найти главные законы спектральных линий и электронных оболочек атомов, включая их значение для химии. Это мне кажется чудом и теперь. **Это наивысшая музыкальность в области мысли**».

А. Зоммерфельд:

«То, что нам сегодня удаётся понять на языке спектров — это истинная музыка атомных сфер, созвучие целочисленных отношений, всё возрастающие порядок и гармония при всём их многообразии. Во все времена теория спектральных линий будет носить имя Бора. Но ещё одно имя навсегда с ней связано — это имя Планка.

Все целочисленные закономерности спектральных линий и атомистики в конце концов вытекают из квантовой теории. Она представляет собой тот **полный таинств инструмент, на котором природа исполняет спектральную музыку** и ритмом которого она управляет строением атомов и атомных ядер».

«Пространственное квантование кеплеровских орбит является одним из самых неожиданных следствий квантовой теории. По простоте вывода и результатов оно похоже на волшебство».

Н. Бор:

«Любой, кто не поражён квантовой теорией, просто её не понимает».

В отличие от классической электродинамики, вместо частоты ω обращения электрона по орбите в квантовую формулу входят частоты квантовых переходов, предсказываемые вторым постулатом Бора. Вместо координаты электрона входят матричные элементы координаты x_{mn} , которые в теории Бора не вычислялись. Эта формула в дальнейшем полностью подтвердилась в квантовой механике.

В 1922 г. завершился этап развития квантовой теории, получивший название «старая квантовая теория», или теория, основанная на принципе соответствия. К этому времени стало ясно, что теория Бора – это лишь промежуточное звено между старыми классическими представлениями и новой квантовой механикой. Необходимо было построить последовательную теорию, где квантовые идеи были бы положены в её основу, а не просто добавлены к классическим уравнениям.

Лекция 4. Волновые свойства частиц

1. Волны де Бройля

В 1924 г. французский физик Луи де Бройль выдвинул смелую гипотезу о том, что двойственный характер волна-корпускула имеет место не только для света, но и для всех микрочастиц. «В оптике в течение столетия слишком пренебрегали корпускулярным способом рассмотрения по сравнению с волновым; не делалась ли в теории вещества обратная ошибка? Не думали ли мы чрезмерно о картине частиц, пренебрегая картиной волн?», – писал он.

В 1905 г. Эйнштейн ввёл кванты света (фотоны), определяемые соотношениями (2.1) и (2.2)

$$\varepsilon = h\nu,$$
$$p = \frac{h}{\lambda}.$$

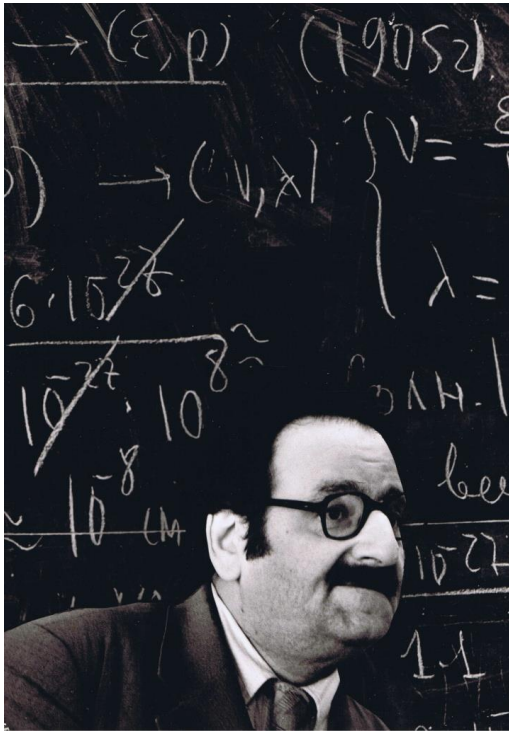
Де Бройль предположил, что между корпускулярными и волновыми характеристиками электрона существует аналогичная связь:

$$\nu = \frac{\varepsilon}{h}, \quad (4.1)$$

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (4.2)$$

«Мне кажется, что основная идея квантовой теории состоит в невозможности представить определённую порцию энергии, не связав с нею определённой частоты», – отмечает де Бройль. Свою теорию он изложил в докторской диссертации «Исследования по теории квантов».

Было известно, что в классической аналитической механике формальная аналогия между траекториями частиц и световыми лучами устанавливается с помощью понятия действия, – того самого понятия, которое явилось основой для введения квантов Планком. «Не подтверждает ли это в самом деле мысль, что квант действия служит соединительным звеном между корпускулярными и волновыми представлениями о материальных частицах?» – размышляет де Бройль.



М.С. Свирский, 1975 г.
(Фото С.Г. Новикова)

Дебройлевская длина волны для обычных, макроскопических, тел слишком мала, чтобы её можно было обнаружить и измерить. Например, для тела массой 1 г, движущегося со скоростью 1 см/с длина волны де Бройля согласно (4.2) составит величину порядка 10^{-27} см. Совсем другое дело – для электрона, движущегося в атоме водорода со скоростью 10^8 см/с. Действительно, согласно

$$\lambda \approx \frac{6 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}}{10^{-27} \text{ г} \cdot 10^8 \text{ см/с}} \approx 10^{-8} \text{ см},$$

то есть в этом случае длина волны де Бройля сравнима с размерами атома.

Пучок электронов, ускоренных разностью потенциалов V , приобретает скорость, которая в соответствии с законом сохранения энергии

$$\frac{mv^2}{2} = eV$$

определяется выражением $v = \sqrt{2eV/m}$. Поэтому длина волны де Бройля

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meV}}.$$

Для $V = 150$ В длина волны снова оказывается порядка 1Å , т.е. порядка длины волны мягких рентгеновских лучей. Волновые свойства, в частности, дифракция, могут наблюдаться на дифракционной решётке, постоянная которой соизмерима с длиной волны. Поэтому, как и для рентгеновских лучей, дифракцию электронов можно обнаружить с помощью кристалла, являющегося естественной дифракционной решёткой.

2. Экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля

Гипотеза де Бройля получила надёжное подтверждение в экспериментах по дифракции частиц на кристаллах. В опытах К. Дэвиссона и Л. Джермера (1927 г.) наблюдалась дифракция электронных волн при отражении электронного пучка от монокристалла никеля по методу Брэгга. Как и в случае рентгеновских лучей, максимумы интенсивности отражения наблюдались в соответствии с формулой Вульфа–Брэгга

$$n\lambda = 2d \sin\varphi, \quad (4.3)$$

где φ – угол скольжения, d – межплоскостное расстояние. Разность хода волн, отражённых от двух соседних кристаллических плоскостей, равна целому числу длин волн де Бройля.

С учётом гипотезы де Бройля

$$n \frac{h}{p} = 2d \sin\varphi. \quad (4.4)$$

Меняя импульс электронов (а значит, их энергию за счет изменения ускоряющей разности потенциалов), можно изменить картину дифракции. Таким образом можно проверить справедливость формулы де Бройля.

В опытах Дж. П. Томсона (1928 г.) и П.С. Тартаковского (1927 г.) для наблюдения дифракции электронов использовался метод Дебая–Шеррера. При пропускании пучка электронов через поликристаллическую фольгу толщиной порядка 10^{-5} см на фотопластинке, расположенной за фольгой, получалось центральное пятно, окруженное дифракционными кольцами (рис. 19).



Рис. 19. Электронограмма, полученная в опытах Томсона и Тартаковского

В поликристаллической фольге отдельные монокристаллики расположены хаотическим образом. Если какой-нибудь из кристалликов удовлетворяет условию (4.3), то на фотопластинке должно получиться пятно в точке падения дифрагированного луча. Среди хаотически расположенных кристалликов найдутся такие, положение которых будет отличаться от данного кристаллика только поворотом вокруг оси, совпадающей с направлением падающего пучка. В результате на фотопластинке вместо пятна получится дифракционное кольцо.

Для того чтобы убедиться в том, что система дифракционных колец образуется самими рассеянными электронами, а не вторичными рентгеновскими лучами, на пути рассеянных электронов между фольгой и фотопластинкой Томсон включил магнитное поле. При этом за счет действия на электроны силы Лоренца вся дифракционная картина смещалась и искажалась, в то время как картина дифракции, получаемая с помощью рентгеновских лучей, должна была оставаться неизменной.

30 апреля 1897 г. Джозеф Джон Томсон сделал доклад на заседании Лондонского Королевского общества о своих исследованиях свойств катодных лучей. Этот день считается днем рождения первой элементарной частицы в физике – электрона. Почти тридцать лет спустя, в мае 1927 г. его сын Джордж Паджет Томсон доказал, что электрон – это волна. Каждый из них открыл одну из сторон двойственной природы электрона. Оба они за свои открытия отмечены Нобелевской премией.

В то время, когда де Бройль сформулировал идею о волновых свойствах электрона, ещё не было никаких экспериментальных доказательств. Поэтому она не сразу была воспринята современниками. Сам научный руководитель диссертационного исследования, Поль Ланжевен, так охарактеризовал работу своего ученика: «Идеи диссертанта, конечно, вздорны, но развиты с таким изяществом и блеском, что я принял диссертацию к защите».

В 1930 г. О. Штерн и И. Эстерман провели опыты по дифракции атомов гелия, неона, молекул водорода и дейтерия на кристаллах. В 1936 г. Д. Митчелл и

П. Пауэрс обнаружили дифракцию медленных (тепловых) нейтронов методом брэгговского рассеяния.

В 1961 г. немецкий физик Клаус Йонссон из Тюбингенского университета провёл эксперимент, подобный опытам Томаса Юнга (1801 г.) по интерференции света. В опытах Юнга (рис. 20) свет проходил через две маленькие щели в непрозрачной пластинке, каждая из которых сама становилась источником световых волн, взаимодействующих между собой. В результате на экране, расположенном сзади, появлялась интерференционная картина, которая доказывала волновую природу света.



Рис. 20. Опыты Юнга по интерференции света на двух щелях

Спустя 160 лет после опытов Юнга Йонссон получил интерференционную картину, используя вместо лучей света пучки электронов, доказав тем самым, корпускулярно-волновую природу электронов.

Для того чтобы почувствовать неклассический характер поведения электронов в этих экспериментах, проведём сравнение с поведением маленьких металлических шариков, пролетающих через устройство, подобное тому, что было у Юнга. Пусть каждая щель имеет заслонку, позволяющую закрывать её. Открывая поочерёдно одну и вторую щель, можно обнаружить, что шарики падают в экран напротив каждого из отверстий. Результат прохождения шариков через какую-либо одну щель не зависит от того, открыта или закрыта при этом другая щель.

Электроны ведут себя совсем иначе. Если открыты обе щели, то на экране образуется картина интерференции, аналогичная той, которая получается в опыте со светом. На движение каждого электрона влияют обе щели.

Может быть, возникающая интерференционная картина обусловлена взаимодействием электронов друг с другом? Для проверки этого предположения нужно выстреливать электроны из электронной пушки по одному, исключив взаимодействие между ними. Счётчик Гейгера (регистрирующий заряженные частицы), подсоединённый к экрану, будет подавать сигнал при каждом попадании электрона в него. При достаточном времени наблюдения мы обнаружим картину интерференции, свидетельствующую о том, что каждый электрон проходит через двухщелевое устройство независимо от других электронов, и ведёт себя при этом как волна, взаимодействуя с самим собой.

Если перед одной из щелей установить детектор, то мы обнаружим, что электроны перестают вести себя как волны. Они попадают в детектор дискретно, порциями, проявляя свойства классических частиц. Электроны пролетают либо через первую, либо через вторую щель, давая на экране две полосы напротив каждой из щелей. При выключении детектора интерференционная картина восстанавливается.

Таким образом, если эксперимент поставить так, что в принципе невозможно выяснить, через какую щель прошёл электрон, то на экране, расположенном позади щелей, возникает интерференционная картина. Если принципиально возможно установить, через какую щель прошёл электрон, то интерференции нет. Этот эксперимент заставляет нас задуматься о роли процесса измерения в квантовой механике.



**Луи де Бройль
(1892–1987)**

Выдающийся французский физик-теоретик, один из основоположников квантовой механики.

Удостоен Нобелевской премии в 1929 г. «за открытие волновой природы электронов».

Член многих академий наук и научных обществ.

Принадлежал к старинному аристократическому роду Бройльи, унаследовал титул герцога.

«Связь между волнами и частицами – это, по-видимому, великий закон природы, причём такой дуализм тесно связан с существованием и внутренней сущностью кванта действия. Нет никаких причин считать, что только электроны обладают такими свойствами. Неудивительно, что мы встречаемся с дуализмом волна-частица при изучении всех физических объектов».

«...возникла необходимость создать новую механику волнового характера, которая будет относиться к старой механике, как волновая оптика к геометрической оптике. Точно и тщательно эта идея была осуществлена в бессмертной работе Шрёдингера».

«Мы никогда не должны забывать (история наук это доказывает), что каждый успех нашего познания ставит больше проблем, чем решает, и что в этой области каждая новая открытая земля позволяет предполагать о существовании еще неизвестных нам необъятных континентов».

Луи де Бройль, «По тропам науки».

3. Волновая функция свободно движущейся частицы

Наличие у частицы волновых свойств позволяет сопоставить ей некоторое волновое поле, которое описывается скалярной функцией координат и времени. По предложению Эрвина Шрёдингера она была обозначена греческой буквой Ψ (пси). Состоянию свободной частицы, движущейся с постоянной скоростью v , соответствует плоская монохроматическая волна

$$\Psi = A e^{i(\vec{k} \vec{r} - \omega t)}, \quad (4.5)$$

где A – её амплитуда. Учитывая гипотезу де Бройля, можно выразить волновое число и частоту через импульс и энергию частицы

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar}, \quad (4.6)$$

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar}. \quad (4.7)$$

Подставляя (4.6) и (4.7) в (4.5), получаем волновую функцию де Бройля для свободной частицы

$$\boxed{\Psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)},} \quad (4.8)$$

которая была введена Шрёдингером в 1926 г.

Основной постулат квантовой механики утверждает, что задание волновой функции полностью определяет все свойства системы в данном состоянии. Волновая функция заменяет совокупность «привычных» для классической механики физических параметров (координата, скорость, импульс и т.д.). В отличие от электромагнитных волн, Ψ -волны не связаны с переносом массы или энергии, они не являются порождением какого-либо силового поля и поэтому не могут произвести никакого физического действия.

Пусть волна распространяется вдоль оси x . Тогда вместо (4.5) получим

$$\Psi = A e^{i(kx - \omega t)}. \quad (4.9)$$

Рассмотрим некоторую точку x , где фаза волны имеет определённое значение. Координата этой точки удовлетворяет условию

$$\varphi = kx - \omega t = \text{const.}$$

Дифференцируя это равенство по времени, получим скорость перемещения фазы в пространстве

$$v_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{\varepsilon}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v}, \quad (4.10)$$

т.е. фазовая скорость волны де Бройля оказывается больше скорости света

$$\boxed{v_{\text{фаз}} = \frac{c^2}{v} > c.} \quad (4.11)$$

Однако это не противоречит СТО. Если события не связаны причинно-следственными связями, то скорость может быть любой. Фазовая скорость – это скорость распространения состояния, она не связана с переносом материальных объектов или энергии.

В отличие от электромагнитных волн для волн де Бройля даже в вакууме имеет место дисперсия (т.е. зависимость частоты от волнового числа и от длины волны). Чтобы показать это, запишем выражение для энергии частицы в нерелятивистском пределе ($v \ll c$), когда справедлива механика Ньютона,

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2} = m_0 c^2 \sqrt{1 + \frac{c^2 p^2}{m_0^2 c^4}} \approx m_0 c^2 + \frac{p^2}{2m_0}. \quad (4.12)$$

В соответствии с соотношениями де Бройля (4.1) и (4.2)

$$E = \hbar \omega, \quad p = \hbar k.$$

Поэтому из (4.12) вытекает зависимость частоты от волнового числа

$$\omega = \frac{m_0 c^2}{\hbar} + \frac{\hbar k^2}{2m_0}. \quad (4.13)$$

Следовательно, фазовая скорость волн де Бройля $v_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k}$ также есть функция k .

4. Статистическая интерпретация волн де Бройля

При попытке выяснить физический смысл волн де Бройля были сформулированы несколько идей.

1) Первая точка зрения заключалась в том, что волны де Бройля – это волны, возникающие в среде из большого числа микрочастиц. Такое объяснение возникло из аналогии со звуковыми волнами, для распространения которых нужна среда, содержащая колеблющиеся частицы. Каждый электрон по отдельности не является волной, и только поток их большой совокупности проявляет волновые свойства.

Эта точка зрения была опровергнута сначала логически, а затем экспериментально. Если бы отдельный электрон не имел волновых свойств, то в одноэлектронном атоме – атоме водорода волны де Бройля не должны были бы

существовать. Однако движение электрона в атоме водорода регулируется волнами де Бройля. Действительно, правило квантования круговых орбит (3.15)

$$r p = n \frac{h}{2\pi},$$

введённое Бором, можно переписать на языке волн де Бройля. Для этого умножим обе части этого равенства на 2π , тогда получим $2\pi r p = n h$,

откуда следует, что длина круговой орбиты

$$L = 2\pi r = n \frac{h}{p} = n\lambda. \quad (4.14)$$

А это есть условие максимума для дифракционной решётки!

Таким образом, благодаря гипотезе де Бройля, удалось разрешить загадку стационарных орбит. Стационарные орбиты отличаются от всех других возможных орбит тем, что на них укладывается целое число длин волн де Бройля (рис. 21). Как заметил А. Эйнштейн, атом ведёт себя подобно маленькому акустическому инструменту, в котором создаются стоячие волны. Де Бройль «угадал аналогию со стоячими волнами, которые встречаются, например, в случае собственных частот органных труб и струн в акустике» [37], стр. 235.

Для того чтобы продемонстрировать аналогию между волновыми свойствами электрона в атоме и колебаниями струн музыкальных инструментов, Моисей Соломонович приносил с собой на лекцию скрипку. На длине струны, закреплённой с двух концов, всегда укладывается целое число полуволн $\lambda/2$. Длина волны может меняться только дискретно. Если свернуть струну в кольцо, то получится аналог орбиты электрона в атоме. Заменяя движение электрона-частицы колебаниями волн, соответствующих электрону, получим, что его устойчивое движение будет наблюдаться только в случае, когда на длине орбиты будет укладываться целое число «электронных волн».

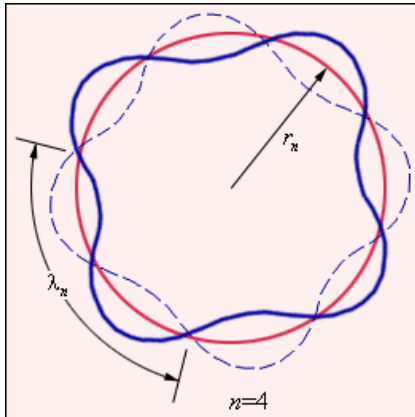


Рис. 21. Возникновение стоячих волн на стационарной боровской орбите для случая $n = 4$



М.С. Свирский
(Фото Л.В. Бородулиной)

Несостоятельность первой точки зрения на природу волн де Бройля была доказана и экспериментально. В 1949 г. московские физики В.А. Фабрикант, Л.А. Биберман и Н.Г. Сушкин поставили опыты по дифракции электронов, в которых исключалось их взаимодействие в процессе дифракции. Электроны пропускались через установку поочерёдно, «гуськом», при этом время между прохождением двух последовательных электронов в 30 000 раз превышало время прохождения через прибор одного электрона. При длительной экспозиции получалась такая же дифракционная картина, как и при большом числе электронов за короткое время. Этим было показано, что каждый электрон в отдельности обладает волновыми свойствами.

2) Другой подход заключался в попытке представить частицу (например, электрон) в виде суперпозиции волн, т.е. отождествить её с волновым пакетом,

образованным из волн де Бройля. Электрон движется с групповой скоростью этого пакета. В какой-то малой области пространства волны будут усиливать друг друга, а вне этой области будет происходить их взаимное гашение.

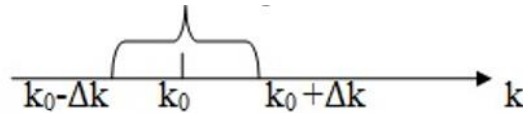


Рис. 22. Локализация волнового пакета вблизи волнового числа k_0

Такой пакет волн, мало отличающихся друг от друга по длине волны и по направлению распространения, можно представить в виде

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} C(k) e^{i(kx - \omega t)} dk, \quad (4.15)$$

где амплитуда $C(k)$ есть медленно меняющаяся функция k . Центр группы волн будет перемещаться со скоростью, которая называется групповой скоростью волнового пакета (Приложение I):

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(2\pi\nu)}{d\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)} = \frac{d(h\nu)}{d\left(\frac{h}{\lambda}\right)} = \frac{dE}{dp}. \quad (4.16)$$

Для свободной частицы согласно формуле Эйнштейна из СТО

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2}.$$

Поэтому

$$\frac{dE}{dp} = \frac{2c^2 p}{2\sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2}} = \frac{p}{m} = v.$$

Таким образом,

$$\boxed{v_{\text{гр}} = v}, \quad (4.17)$$

т.е. совпадает с механической скоростью самой частицы.

Это совпадение явилось важным аргументом в пользу концепции волнового пакета. Из неё вытекает также соотношение неопределённостей Гейзенберга. Учитывая, что $\Delta x \cdot \Delta k \geq 2\pi$ (формула (1.14) Приложения I), получаем

$$\Delta x \cdot \Delta \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) \geq 2\pi,$$

откуда после умножения обеих частей этого неравенства на h , следует

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h}. \quad (4.18)$$

Это соотношение показывает, что для микрочастицы нельзя одновременно определить её координату и импульс. Чем точнее определено положение частицы, тем менее точно определен импульс и наоборот. Если известен импульс ($\Delta p_x = 0$), то положение частицы в пространстве оказывается неопределённым ($\Delta x \rightarrow \infty$), у неё нет определённой траектории. Отсюда возник термин «мир утраченных траекторий».

Из (4.18) следует соотношение неопределённостей для энергии и времени. Действительно, учитывая, что

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad \Delta E = \frac{p\Delta p}{m} = v\Delta p, \quad v = \frac{\Delta x}{\Delta t},$$

получаем

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h. \quad (4.19)$$

Это – соотношение Гейзенберга–Бора, связывающее неопределённость в изменении энергии микрочастицы с неопределённостью момента времени, когда это изменение произошло. Мысленный эксперимент Эйнштейна, целью которого было подвергнуть на прочность соотношение (4.19), изложен, например, в книге А. Пайса [25], с. 428–429.

Однако и вторая точка зрения оказалась несостоятельной. Можно с помощью группы волн построить волновой пакет с размерами порядка радиуса частицы, но с течением времени он расплывается, а электрон – устойчив. Расплывание пакета связано с тем, что фазовая скорость каждой монохроматической волны в пакете зависит от волнового числа (а значит, и от импульса), поэтому каждая из этих волн будет распространяться со своей фазовой скоростью. Время

расплывания волнового пакета связано с областью локализации частицы следующим выражением

$$\tau \sim \frac{m(\Delta x)^2}{h}. \quad (4.20)$$

Для частицы с массой $m \sim 1\text{г}$ и $\Delta x \sim 0,1\text{ см}$ время расплывания $\tau \sim 10^{25}$ сек, т.е. волновой пакет практически не будет расплываться. А в случае электрона $m \sim 10^{-27}\text{ г}$, $\Delta x \sim 10^{-13}\text{ см}$ (классический радиус электрона), поэтому $\tau \sim 10^{-26}$ сек. Такой волновой пакет практически мгновенно расплывётся, т.е. электрон не может представлять собой устойчивого образования, что противоречит экспериментальным фактам.

3) Была предложена также теория ведущей волны (или волны – пилота) де Бройля–Бома (бомовская механика). Представим себе мячик, несущийся по морю на гребне волны. Таким же способом можно создать образ электрона, несущегося на гребне волновой функции. В бомовской механике (по имени Дэвида Бома) волновая функция подчиняется уравнению Шрёдингера, а траектория электрона – второму закону Ньютона. При этом возникает некая новая (квантовая) сила, которая индуцируется ведущей волной.

Де Бройль стремился получить одно уравнение, в котором решение состояло бы из двух частей: гладкая часть описывает волну, а сингулярная – частицу. Он осознавал, что линейное уравнение Шрёдингера должно быть заменено на нелинейное. Но успеха на этом пути не было, большинство физиков очень сдержанно отнеслись к созданию бомовской механики.

4) В 1926 г. Макс Борн предложил статистическую интерпретацию волн де Бройля. Её сущность состоит в следующем.

<p>Волны де Бройля – это волны вероятности. Интенсивность волн де Бройля в каком-либо месте пространства пропорциональна вероятности обнаружить частицу в этом месте.</p>

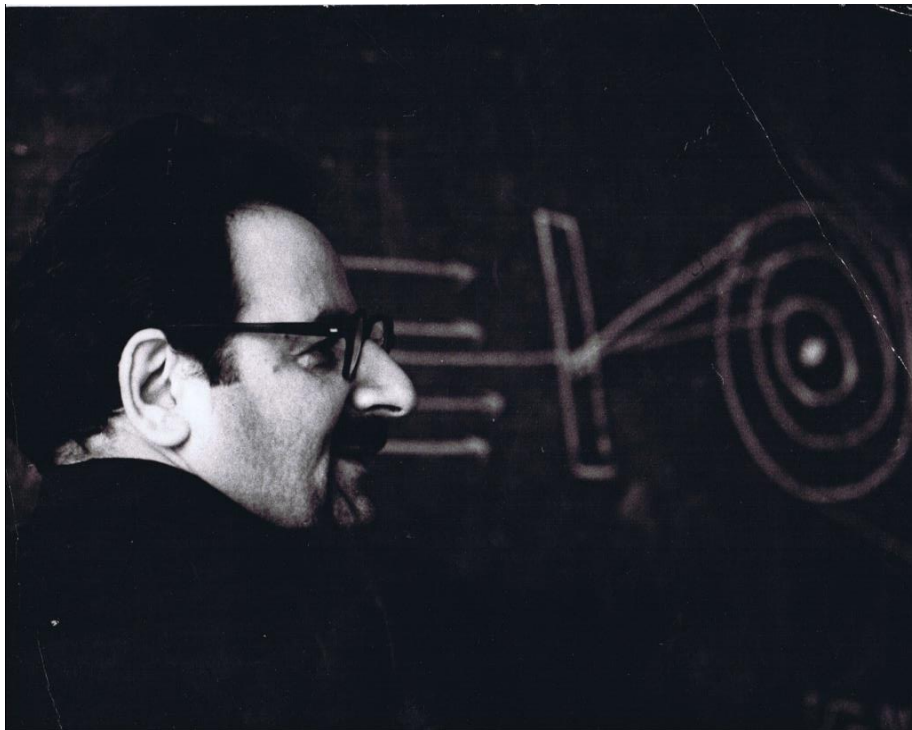
Чтобы понять причины, заставившие Борна сформулировать такую точку зрения, обратимся вновь к опытам по дифракции электронов.

Пусть пучок, падающий на дифракционное устройство (например, кристалл), состоит всего из одного электрона. При прохождении электронной волны де Бройля через кристалл она разбивается на несколько дифракционных пучков. Однако нельзя считать, что в каждом из них находится доля электрона. Если на пути одного из дифрагированных пучков поставить счетчик для регистрации электронов, то он всегда сработает, как только обнаружит целый электрон, а не его часть. В этом проявляется атомизм (неделимость) электрона.

Нельзя также считать, что до обнаружения электрон находился только в одном рассматриваемом пучке, а другие никакой роли не играли. Это означало бы, что электрон проходит через дифракционное устройство как корпускула классической механики, что несовместимо с явлениями интерференции и дифракции электронов.

Если повторить этот же опыт с другим электроном, то он так же обнаружится в одном из дифрагированных пучков, и в общем случае – не в том же самом. В какое место фотопластинки попадет электрон и произведет её почернение, можно предсказать только с той или иной степенью вероятности. Электрон может случайно попасть в ту или иную точку будущего дифракционного кольца. Поэтому поведение электрона должно характеризоваться некоторой вероятностной функцией.

Дифракционная картина не зависит от интенсивности электронного пучка: она возникает и при очень малой интенсивности, и даже при пропускании одиночных электронов друг за другом. Каждый электрон, прошедший через дифрагирующее устройство, оставляет на фотопластинке почерневшее пятнышко (или вызывает сцинтилляции, т.е. вспышки на флуоресцирующем экране), проявляя тем самым корпускулярные свойства. При достаточно большом числе последовательно прошедших электронов распределение пятен на фотопластинке образует дифракционную картину, которая совпадает с картиной, получаемой при пропускании пучка электронов. Электроны преимущественно попадают в точки фотопластинки, соответствующие дифракционным максимумам волн де Бройля.



Моисей Соломонович объясняет опыты по дифракции электронов
(Фото С.Г. Новикова, 1975 г.)

Интенсивность почернения фотопластинки в данном месте будет пропорциональна числу попадающих в него электронов.

Такое поведение электронов привело Борна к статистическому толкованию волн де Бройля, которое позволило сочетать атомизм, случайный характер попадания электрона в ту или иную точку фотопластинки и его волновые свойства.

В классической физике интенсивность пропорциональна квадрату амплитуды колебаний ($\mathcal{I} \sim A^2$). Если амплитуда одного колебания A_1 в два раза больше амплитуды другого колебания $A_1 = 2A_2$, то интенсивность первого колебания в 4 раза больше интенсивности второго колебания: $\mathcal{I}_1 = 4\mathcal{I}_2$. То есть амплитуды A_1 и A_2 соответствуют двум разным физическим состояниям системы.

В квантовой механике интенсивность волн де Бройля определяет вероятность W местонахождения частицы. Поэтому имеем:

$$J \sim W. \quad (4.21)$$

По аналогии с классической физикой интенсивность волн де Бройля должна быть пропорциональна квадрату амплитуды вероятности $\Psi(\vec{r}, t)$. Но эта величина, как видно из (4.8), является комплексной. А вероятность W является вещественной и положительной величиной. Поэтому следует взять квадрат модуля амплитуды вероятности

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*, \quad (4.22)$$

где Ψ^* – комплексно сопряжённая волновая функция. Поэтому из (4.21) и (4.22) следует, что вероятность местонахождения частицы

$$W \sim |\Psi|^2. \quad (4.23)$$

Вероятность найти частицу в окрестности точки x, y, z зависит от размера выбираемой области. Рассматривая бесконечно малую область

$$x, x+dx; y, y+dy; z, z+dz,$$

можно считать, что внутри этой области Ψ является постоянной величиной, поэтому вероятность найти частицу пропорциональна объёму этой области $dV = dx dy dz$, т.е. $dW \sim dV$. Учитывая (4.23), получаем

$$dW = |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV. \quad (4.24)$$

Величина

$$\boxed{|\Psi|^2 = \frac{dW}{dV}} \quad (4.25)$$

называется плотностью вероятности. Квадрат модуля волновой функции (т.е. амплитуды вероятности) даёт вероятность найти (обнаружить) частицу в том или ином месте пространства. Таким образом, квантовая механика даже для одной частицы является статистической теорией.

Если проинтегрировать (4.24) по всему объёму, то получится вероятность того, что в момент времени t частица находится где-нибудь внутри этого объёма. А это есть вероятность достоверного события, поэтому

$$\int_V dW = 1,$$

откуда получаем условие нормировки волновой функции для дискретного спектра

$$\boxed{\int_V |\Psi|^2 dV = 1}. \quad (4.26)$$

В случае свободной частицы, описываемой с помощью волновой функции (4.8), комплексно сопряжённая функция имеет вид

$$\Psi^* = A e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \vec{r} - Et)}.$$

Поэтому плотность вероятности

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^* = |A|^2 = \text{const}$$

будет одинакова для всех точек пространства, т.е. свободная частица не локализована в определённом месте, она с равной вероятностью может находиться в любой точке пространства. Это согласуется с соотношением неопределённостей Гейзенберга для координаты и импульса (4.18), согласно которому $\Delta x = \infty$ при $\Delta p_x = 0$. Таким образом, волна де Бройля описывает частицу с фиксированным импульсом и неопределённой координатой.

Борновская вероятностная интерпретация волновой функции отражает статистическую природу квантовых объектов. Но вероятностный характер их поведения не сводится к неопределённости в классическом понимании, где она связана с неполнотой знания об объекте.

Предложенная Борном статистическая трактовка волновой функции стала общепризнанной. Однако ряд крупных физиков с ней не был согласен. В частности, Эйнштейн возражал против вероятностного описания микромира. В декабре 1926 г. он писал в письме М. Борну: «Квантовая механика производит сильное впечатление, но внутренний голос говорит мне, что это всё не то. Из этой теории удаётся извлечь очень много, но она вряд ли подводит нас к разгадке секретов Всевышнего». И добавлял: «Бог не играет в кости». Для основателя волновой механики – Шрёдингера статистическое истолкование квантовой теории было так же неприемлемо.



**Макс Борн
(1882–1970)**

Выдающийся немецкий физик-теоретик.

Совместно с В. Гейзенбергом и П. Йорданом разработал формализм матричной квантовой механики.

Совместно с Н. Винером ввёл в квантовую механку понятие оператора.

Автор статистической интерпретации волновой функции (1926 г.)

В 1954 г. удостоен Нобелевской премии «за фундаментальные исследования по квантовой механике, особенно за статистическую интерпретацию волновой функции».

Пианист, тонкий ценитель классической музыки.

«Я изучал философов всех времён и встретил у них множество ярких идей, но не смог усмотреть никакого стабильного прогресса к более глубокому познанию или пониманию сути вещей. Наука, напротив, наполняет меня чувством устойчивого прогресса, и я убеждён, что именно теоретическая физика есть подлинная философия».

«Для меня преподавание было делом приятным, особенно преподавание в университете. По-моему, задачу преподнесения научных истин так, чтобы увлечь студентов и побудить их творчески мыслить, можно решить лишь на уровне искусства, подобного искусству романиста или даже драматурга. Это же требуется и для написания учебников».

«Я верю, что, осознав грозящую опасность, человечество стряхнёт с себя власть техники, перестанет хвастаться своим всемогуществом и вернётся к действительным ценностям, которые поистине разумны и необходимы: к миру, любви, скромности, уважению, удовлетворённости, высокому искусству и истинной науке».

На его надгробном камне на кладбище в Гёттингене выбито одно из его главных достижений — фундаментальное перестановочное соотношение

$$pq - qp = h/2\pi i .$$

«Существует чрезвычайно близкая формальная аналогия между квантовой механикой и старой механикой. Все элегантные черты старой механики могут быть перенесены в новую, где они появляются с удвоенной красотой».

П.А.М. Дирак

ТЕМА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Лекция 5. Уравнение Шрёдингера

1. Оптико-механическая аналогия Гамильтона и её роль в возникновении квантовой механики

В 1926 г. выдающийся австрийский физик Эрвин Шрёдингер установил волновое уравнение, которое явилось обобщением гипотезы де Бройля о волновых свойствах частиц. По образному выражению А. Зоммерфельда, Шрёдингер проделал путь Гамильтона в обратном направлении от корпускулярной классической механики к волновой механике. Согласно оптико-механической аналогии, установленной в 1834 г. У. Гамильтоном, закономерности классической механики и геометрической оптики можно представить в одной и той же математической форме. В оптике световые лучи ортогональны к волновым поверхностям постоянной фазы (фронту волны). В механике траектории материальной точки ортогональны к поверхностям постоянного действия. Существует определённая аналогия вариационных принципов: принципа Гамильтона (наименьшего действия) в механике и принципа Ферма (наименьшего времени) в геометрической оптике. Подобно тому, как геометрическая оптика является частным случаем волновой оптики, так и классическая механика должна быть частным случаем волновой механики.

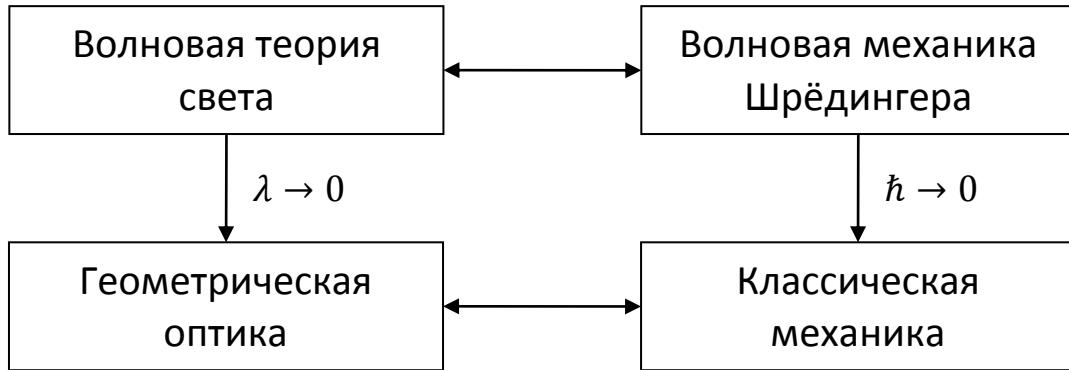


Рис. 23. Оптико-механическая аналогия

Опираясь на аналогию между классической механикой и геометрической оптикой, Шрёдингер пришёл к заключению о том, что «целесообразно построить «волновую механику», и первым шагом на этом пути является, конечно, волновое истолкование представлений Гамильтона». Сам Гамильтон работал в XIX веке, когда ещё не были открыты эффекты, зависящие от длины волны частицы, и поэтому не было необходимости во введении кванта действия \hbar .

Уравнение Шрёдингера не имеет строгого вывода, так же, как не выводятся законы Ньютона в механике или уравнения Максвелла в электродинамике. Оно представляет собой существенно новый принцип и должно быть постулировано. Для установления этого уравнения необходимо учесть требования, налагаемые на волновую функцию:

- 1) уравнение должно быть линейным и однородным для того, чтобы волновая функция Ψ удовлетворяла принципу суперпозиции, который имеет место для волновых процессов. Это означает, что если волновые функции Ψ_1 и Ψ_2 являются решениями уравнения, то и всякая линейная комбинация $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ этих функций также является решением этого уравнения;
- 2) уравнение должно быть дифференциальным уравнением первого порядка относительно времени. Тогда задание Ψ в начальный момент времени будет определять последующую эволюцию Ψ ;

3) уравнение должно удовлетворять принципу соответствия. Его решения должны в частных предельных случаях приводить к предсказаниям классической механики.

К уравнению Шрёдингера можно прийти, опираясь на ряд соображений, поясняющих его установление. Рассмотрение этого уравнения начнём со случая свободной частицы. Найдём дифференциальное уравнение, которому удовлетворяет волновая функция де Бройля

$$\Psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \vec{r} - Et)}. \quad (5.1)$$

Дифференцируя её два раза по координате x , с учётом того, что скалярное произведение $(\vec{p} \vec{r}) = p_x x + p_y y + p_z z$,

получим

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p_x \Psi, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{p_x^2}{\hbar^2} \Psi.$$

Аналогичные формулы имеют место для производных по y и z , поэтому

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\hbar^2} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \Psi,$$

или

$$\nabla^2 \Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi.$$

Умножая обе части этого равенства на $-\frac{\hbar^2}{2m}$, получаем уравнение Шрёдингера для свободной частицы, в котором волновая функция зависит только от её координат

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = E \Psi}. \quad (5.2)$$

Перейдём к обобщению уравнения Шрёдингера на случай частицы, движущейся в силовом поле.

1) Запишем классическое волновое уравнение Даламбера, известное из курса «Математическая физика»

$$\nabla^2 \Psi = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}, \quad (5.3)$$

где v – фазовая скорость волны. В случае гармонической зависимости от времени

$$\Psi = \Psi(\vec{r})e^{-i\omega t} . \quad (5.4)$$

Учитывая, что

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -\omega^2\Psi ,$$

получаем из (5.3) дифференциальное уравнение

$$\nabla^2 \Psi = -\frac{\omega^2}{v^2} \Psi. \quad (5.5)$$

2) Согласно оптико-механической аналогии в случае однородной и изотропной среды фазовая скорость

$$v = \frac{E}{p} = const . \quad (5.6)$$

Полная энергия частицы есть сумма кинетической и потенциальной энергии

$$E = \frac{p^2}{2m} + U, \quad (5.7)$$

откуда следует, что импульс $p = \sqrt{2m(E - U)}$. Подставляя это выражение в (5.6), получаем

$$v = \frac{E}{\sqrt{2m(E - U)}} . \quad (5.8)$$

Из (5.5) с учётом (5.8) следует уравнение

$$\nabla^2 \Psi + 2m(E - U) \frac{\omega^2}{E^2} \Psi = 0. \quad (5.9)$$

3) Согласно гипотезе де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar} . \quad (5.10)$$

Подставляя (5.10) в уравнение (5.9), получаем уравнение Шрёдингера в потенциальном силовом поле, не зависящем от времени

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi = E\Psi} . \quad (5.11)$$

Такой же результат получается, если в правой части уравнения Шрёдингера (5.2) для свободной частицы вместо кинетической энергии частицы подставить разность $(E - U)$. Однако эта замена не является строго обоснованной. Кинетическая энергия является функцией импульса, а потенциальная энергия зависит от координаты частицы, но согласно соотношению неопределённостей Гейзенберга канонически сопряжённые координата и импульс не могут быть определены одновременно точно. Т.е., зная кинетическую энергию частицы, нельзя точно определить её потенциальную энергию.

Функция (5.4) с учётом (5.10) имеет вид

$$\Psi = \Psi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t},$$

поэтому

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi.$$

Умножая обе части этого уравнения на $i\hbar$, получаем

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = E\Psi. \quad (5.12)$$

Из сравнения уравнений (5.12) и (5.11) следует

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi.} \quad (5.13)$$

Это уравнение Шрёдингера в общем виде, где волновая функция Ψ зависит от координат x, y, z и времени t . Оно представляет собой дифференциальное уравнение в частных производных второго порядка относительно координат и первого порядка относительно времени. Этим оно отличается от классического волнового уравнения (5.3), которое содержит производные второго порядка как по координате, так и по времени.

Уравнение (5.13) является основным уравнением нерелятивистской квантовой механики. Оно играет в квантовой механике такую же роль, как и уравнение второго закона Ньютона в классической механике.



**Эрвин Шрёдингер
(1887–1961)**

Выдающийся австрийский физик, один из главных творцов квантовой механики. Установил основное уравнение нерелятивистской квантовой механики (1926 г.).

Показал математическую эквивалентность волновой и матричной квантовой механики.

Образец универсального теоретика (квантовая механика, электродинамика, статистическая механика и термодинамика, элементарные частицы и космические лучи, общая теория относительности, космология, единые геометризованные теории поля, учение о цвете, связь физики с биологией).

Автор книги «Что такое жизнь с точки зрения физики?» (1944 г.).

В 1933 г. совместно с Дираком удостоен Нобелевской премии «за открытие новых плодотворных форм атомной теории».

Глубокий знаток античной и восточной философии, мировой литературы. Владел шестью языками.

Макс Борн:

«Что существует более выдающегося в теоретической физике, чем его первые шесть работ по волновой механике?»

Планк – Шрёдингеру:

«Читаю Вашу статью с тем же напряжением, с каким любопытный ребёнок выслушивает развязку загадки, над которой он долго мучился, радуюсь красотам, раскрывающимся перед моими глазами...».

Эйнштейн – Шрёдингеру:

«Замысел Вашей работы свидетельствует о подлинной гениальности».

О книге Шрёдингера

«Что такое жизнь с точки зрения физики?»

«На мой взгляд, будет справедливо сказать, что Шрёдингер, сформулировав своё волновое уравнение, несёт основную ответственность за современную биологию».

Лайнус Полинг

«Эрвин Шрёдингер, подобно Гейзенбергу, закончил классическую гимназию, где основными предметами были латинский и греческий языки. Полученное им гуманитарное образование сильно повлияло на его позднейшие взгляды на науку и жизнь, а также заложило фундамент глубокого интереса к проблемам классической и современной философии, о чем красноречиво свидетельствуют его труды».

Макс Джеммер

С января по июнь 1926 г. Шрёдингер опубликовал в немецком физическом журнале «Annalen der Physik» («Анналы физики») четыре работы под общим названием «Квантование как задача о собственных значениях», в которых были заложены основы волновой механики. Волновое уравнение, занимающее в ней центральное место, было воспринято физиками с большим воодушевлением, поскольку оно выражало законы квантовой механики в «привычной» форме дифференциального уравнения, в отличие от матричной механики Гейзенберга, созданной на полгода раньше. Волновая механика была близка по духу классической механике сплошных сред. Шрёдингер очень критически высказывался по поводу матричной теории Гейзенберга: «Конечно, я знал о его теории, однако меня отпугивали, если не сказать отталкивали, казавшиеся мне очень трудными методы трансцендентной алгебры и отсутствие всякой наглядности». В том же 1926 г., в статье «Об отношении квантовой механики Гейзенберга — Борна — Йордана к моей», Шрёдингер доказал математическую эквивалентность двух форм квантовой механики: волновой и матричной.

Установленное им уравнение Шрёдингер применил, в первую очередь, в задаче о водородоподобном атоме. А затем оно позволило не только объяснить многие известные экспериментальные закономерности, но и сыграло огромную эвристическую роль, позволив предсказать эффекты, о которых классическая физика не подозревала.

2. Стационарные состояния

Среди решений уравнения Шрёдингера особое значение имеют стационарные состояния, волновая функция которых зависит от времени так же, как и волновая функция де Бройля

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (5.14)$$

Стационарные состояния в квантовой механике имеют следующие особенности:

1) Зависимость волновых функций стационарных состояний от времени (5.14) однозначно определяется значением энергии в этом состоянии. Стационарные состояния – это состояния с определённой энергией. Они играют

такую же роль, как и стационарные состояния в теории Бора. Действительно, дифференцируя функцию (5.14) по времени, получаем уравнение

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi(\vec{r}, t).$$

Умножив обе части его на $i\hbar$, приходим к уравнению, совпадающему с (5.12)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi,$$

и, следовательно, с (5.11)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U \Psi = E \Psi.$$

Поэтому уравнение Шрёдингера в форме (5.11) называется стационарным уравнением Шрёдингера (или уравнением Шрёдингера для стационарных состояний).

2) В стационарных состояниях квадрат модуля волновой функции, т.е. плотность вероятности, не зависит от времени.

Действительно, плотность вероятности в случае (5.14) определяется выражением

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^* = \Psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \cdot \Psi^*(\vec{r}) e^{\frac{i}{\hbar} E t} = |\Psi(\vec{r})|^2,$$

которое не зависит от времени

$$|\Psi|^2 \neq f(t).$$

3) В стационарных состояниях плотность тока вероятности не зависит от времени.

Чтобы сделать это утверждение очевидным, необходимо ввести новое понятие плотности тока вероятности.

3. Плотность тока вероятности. Уравнение непрерывности

В электродинамике известно уравнение непрерывности, которое представляет собой дифференциальную форму закона сохранения электрического заряда

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div} \vec{j}. \quad (5.15)$$

В отсутствие стоков или истоков ($\text{div} \vec{j} = 0$) плотность электрического заряда остаётся неизменной ($\rho = \text{const}$). В квантовой механике имеет место аналогичное уравнение для плотности вероятности $|\Psi|^2 = w$ и плотности тока (или потока) вероятности \vec{j}_w . Получим это уравнение.

Запишем уравнение Шрёдингера в случае потенциального силового поля

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi. \quad (5.16)$$

Для комплексно сопряжённой функции уравнение Шрёдингера будет иметь вид

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + U\Psi^*. \quad (5.17)$$

Умножая слева уравнение (5.16) на Ψ^* , а (5.17) на Ψ и вычитая второе уравнение из первого, получим

$$i\hbar \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*). \quad (5.18)$$

Это равенство можно переписать в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Psi \Psi^*) = \frac{i\hbar}{2m} \operatorname{div} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (5.19)$$

Для того чтобы убедиться в этом, докажем следующее тождество

$$\operatorname{div} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \equiv \Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*. \quad (5.20)$$

Запишем подробнее левую часть этого равенства, учитывая, что, как известно из векторного анализа, дивергенция произвольного вектора \vec{a}

$$\operatorname{div} \vec{a} = \frac{\partial a_x}{\partial x} + \frac{\partial a_y}{\partial y} + \frac{\partial a_z}{\partial z} = \sum_{\beta=1}^3 \frac{\partial a_\beta}{\partial \beta},$$

а оператор «набла» имеет вид

$$\nabla = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}.$$

Тогда

$$\operatorname{div} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = \sum_{\beta=1}^3 \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial \beta} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial \beta} \right) = \sum_{\beta=1}^3 \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \beta^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial \beta^2} \right),$$

что, очевидно, совпадает с правой частью (5.20). В процессе вычислений учтено, что из четырёх получающихся при дифференцировании членов два взаимно сокращаются.

Учитывая, что $\Psi\Psi^*$ есть плотность вероятности $|\Psi|^2 = w$, перепишем уравнение (5.19) в виде

$$\frac{\partial w}{\partial t} = - \operatorname{div} \left[\frac{i\hbar}{2m} (\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi) \right]. \quad (5.21)$$

Из сравнения уравнений (5.21) и (5.15) следует, что они имеют одинаковую структуру. При этом роль плотности заряда ρ играет плотность вероятности w , а роль плотности электрического тока – выражение

$$\vec{j}_w = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi), \quad (5.22)$$

которое можно назвать вектором плотности тока вероятности.

Тогда уравнение (5.21) примет следующий вид

$$\frac{\partial w}{\partial t} = - \operatorname{div} \vec{j}_w. \quad (5.23)$$

Это и есть искомое уравнение непрерывности в квантовой механике. Если плотность вероятности изменяется с течением времени (вероятность «течёт»), то возникает поток вероятности.

Рассмотрим следствия, вытекающие из формулы (5.22).

1) Для того чтобы ток вероятности был отличен от нуля, необходимо, чтобы волновая функция была комплексной ($\Psi \neq \Psi^*$). Действительно, если допустить, что Ψ является вещественной ($\Psi = \Psi^*$), то согласно (5.22) $\vec{j}_w = 0$. Этому требованию удовлетворяет, в частности, волновая функция де Бройля для свободной частицы $\Psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$.

2) В самом общем виде комплексную функцию можно записать в виде

$$\Psi = A e^{i\varphi}, \quad (5.24)$$

где φ – фаза. Тогда комплексно сопряжённая волновая функция

$$\Psi^* = A^* e^{-i\varphi}. \quad (5.25)$$

Вычислим градиенты Ψ и Ψ^* :

$$\nabla\Psi = \nabla A \cdot e^{i\varphi} + Aie^{i\varphi}\nabla\varphi, \quad (5.26)$$

$$\nabla\Psi^* = \nabla A^* \cdot e^{-i\varphi} - A^*ie^{-i\varphi}\nabla\varphi. \quad (5.27)$$

Подставляя (5.24) – (5.27) в (5.22), получим

$$\vec{J}_w = |A|^2 \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi.$$

Учитывая, что $|A|^2 = |\Psi|^2 = w$, получаем следующее выражение для плотности тока вероятности

$$\boxed{\vec{J}_w = w \frac{\hbar}{m} \text{grad} \varphi} . \quad (5.28)$$

Из (5.28) видно, что поток вероятности будет отличен от нуля только при условии: $\text{grad} \varphi \neq 0$.

Принято утверждать, что волновая функция Ψ никакого физического смысла не имеет, и что непосредственный физический смысл связывается с квадратом ее модуля $|\Psi|^2$. В действительности дело обстоит следующим образом. Конечно, волновая функция Ψ не является наблюдаемой величиной. Но в ее структуре содержатся характеристики, которые имеют вполне определенный физический смысл. Это – амплитуда A и фаза φ . Очевидно, что амплитуда A волновой функции определяет плотность вероятности, а фаза φ определяет ток вероятности.

3) Для волновой функции де Бройля

$$\varphi = \frac{1}{\hbar} (\vec{p} \vec{r} - Et) , \text{grad} \varphi = \frac{1}{\hbar} \vec{p} ,$$

поэтому согласно (5.28)

$$\vec{J}_w = w \frac{\vec{p}}{m} = w \vec{v}_{\text{классич.}} \quad (5.29)$$

т.е. вероятность «течет» со скоростью частицы в классической механике.

4) Умножим \vec{J}_w и w на массу частицы, тогда получим среднюю плотность вещества

$$\rho_m = m w$$

и среднюю плотность потока вещества

$$\vec{J}_m = \frac{i\hbar}{2} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) .$$

Эти величины подчиняются уравнению непрерывности

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} = - \text{div} \vec{J}_m . \quad (5.30)$$

Физический смысл этого уравнения состоит в том, что изменение массы в некоторой бесконечно малой области обусловлено втеканием или вытеканием этой массы через поверхность, ограничивающую эту область, т.е. (5.30) – это закон сохранения массы в квантовой механике.

5) Умножим \vec{j}_w и w на заряд частицы e , получим среднюю плотность электрического заряда и среднюю плотность электрического тока:

$$\rho_e = ew, \quad \vec{j}_e = \frac{ie\hbar}{2m}(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi).$$

При этом снова получается уравнение непрерывности

$$\frac{\partial\rho_e}{\partial t} = -\operatorname{div}\vec{j}_e, \quad (5.31)$$

которое представляет собой закон сохранения электрического заряда в квантовой механике.

6) Из (5.28) вытекает возможность эффекта Джозефсона, теоретически предсказанного в 1962 г. (Приложение II). Этот эффект состоит в возникновении электрического тока между двумя сверхпроводниками, разделенными тонкой прослойкой изолятора толщиной всего в несколько атомов, при отсутствии приложенного к ним напряжения. Поскольку во всех точках сверхпроводника фаза электронов одна и та же (в этом заключается дальний порядок сверхпроводника), то за счёт разности фаз электронов в первом и втором сверхпроводнике ($\varphi_1 - \varphi_2$) в соответствии с (5.28) должен возникать электрический ток (стационарный эффект Джозефсона). При наличии источника постоянного тока в джозефсоновском контакте возникает переменный ток, который становится источником электромагнитного излучения (нестационарный эффект Джозефсона).

Лекция 6. Сопоставление операторов физическим величинам в квантовой механике

1. Собственные функции и собственные значения операторов

Задачи квантовой механики потребовали применения специального математического аппарата. Такой аппарат был уже разработан в математике – это теория линейных операторов. Дадим определение оператора.

Оператором называется рецепт или правило, по которому одной функции $\Psi(x_1, x_2, x_3, \dots)$ переменных x_1, x_2, x_3, \dots сопоставляется другая функция $\chi(x_1, x_2, x_3, \dots)$ тех же переменных. Операторы будут обозначаться буквами с крышкой (или со шляпкой), например, \hat{L} . Тогда правило перехода от функции Ψ к функции χ запишется в виде

$$\boxed{\chi = \hat{L}\Psi}. \quad (6.1)$$

Оператор \hat{L} может означать, например, дифференцирование по какой-либо переменной, умножение на какую-либо величину, возведение в степень и т.д.

Необходимость введения операторов в квантовой механике можно пояснить на основе следующих соображений.

1) В классической механике все величины изменяются непрерывным образом, в том числе и функция Гамильтона (полная энергия частицы)

$$H = \frac{p^2}{2m} + U = T + U. \quad (6.2)$$

Однако из анализа спектроскопических данных вытекало существование дискретного набора уровней энергии в атоме E_1, E_2, \dots, E_n . Это приводит к необходимости замены непрерывной функции Гамильтона на оператор энергии – гамильтониан, дающий дискретный энергетический спектр

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U} = \hat{T} + \hat{U}, \quad (6.3)$$

где \hat{T} – оператор кинетической энергии, \hat{U} – оператор потенциальной энергии.

Таким образом, в результате действия гамильтониана на какое-либо квантовое состояние Ψ_n появляются избранные значения энергии, представляющие собой собственные значения гамильтониана в этом состоянии

$$\hat{H} \Psi_n = E_n \Psi_n . \quad (6.4)$$

Важную роль сыграли здесь и два постулата Бора, характеризующие свойства атомных систем. Задача об определении стационарных состояний атома с определенными значениями энергии аналогична задачам математической физики, которые приводят к избранным состояниям системы. Фактически это задача на собственные значения линейных операторов, в которой набор целочисленных значений появляется естественным образом.

2) Последовательная квантовая теория, по мнению В. Гейзенберга, должна опираться на наблюдаемые величины. К их числу не относятся электронные орбиты или периоды обращения электронов в атоме. Напротив, частоты спектральных линий и их интенсивности – это то, что можно измерить. Наблюдаемые частоты квантовых переходов образуют матрицу

$$\begin{pmatrix} \nu_{11} & \nu_{12} & \nu_{13} & \dots \\ \nu_{21} & \nu_{22} & \nu_{23} & \dots \\ \nu_{31} & \nu_{32} & \nu_{33} & \dots \end{pmatrix},$$

а матрицы в общем случае не подчиняются коммутативному закону умножения:

$$\hat{L}\hat{M} \neq \hat{M}\hat{L}.$$

Существование спектра собственных значений и некоммутативность – это как раз и есть свойства линейных операторов. В квантовой механике вводится следующий постулат:

Каждой квантово-механической величине L соответствует оператор \hat{L} .
Символически это можно записать так: $L \rightarrow \hat{L}$.

Оператор, действуя на волновую функцию, даёт некоторое число, умноженное на волновую функцию (которая в общем случае может не совпадать с исходной).

Для того чтобы связать операторы с числами, представляющими собой результаты измерений, необходимо для каждого оператора найти его собственные

функции. Запишем определение оператора (6.1) для случая, когда волновая функция остаётся неизменной

$$\boxed{\hat{L} \Psi = \ell \Psi}. \quad (6.5)$$

Если волновая функция Ψ удовлетворяет трём стандартным условиям, т.е. является

1) непрерывной, 2) однозначной, 3) конечной,

тогда Ψ называется собственной функцией оператора \hat{L} , а число ℓ – собственным значением этого оператора.

Рассмотрим примеры.

1) Пусть $\hat{L} = \frac{\partial}{\partial x}$, $\Psi = \sin x$. Тогда

$$\hat{L} \Psi = \frac{\partial}{\partial x} \sin x = \cos x \neq \Psi,$$

т.е. данная волновая функция $\Psi = \sin x$ не является собственной для оператора дифференцирования по координате x .

2) Пусть $\hat{L} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, $\Psi = \sin x$. Тогда

$$\hat{L} \Psi = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sin x = -\sin x = (-1) \sin x.$$

В этом случае волновая функция $\Psi = \sin x$ является собственной функцией оператора $\hat{L} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, при этом собственное значение данного оператора в этом квантовом состоянии $\ell = -1$.

3) Пусть $\hat{L} = \frac{\partial}{\partial x}$, $\Psi = e^x$. В этом случае имеем

$$\hat{L} \Psi = \frac{\partial}{\partial x} e^x = e^x.$$

При действии оператора дифференцирования на волновую функцию Ψ она не изменилась. Однако она не является собственной функцией данного оператора, поскольку не является конечной (при $x \rightarrow \infty$ функция e^x так же стремится к бесконечности).

4) Пусть $\hat{L} = \frac{\partial}{\partial x}$, $\Psi = e^{ix}$. Тогда

$$\hat{L} \Psi = \frac{\partial}{\partial x} e^{ix} = ie^{ix}.$$

Данная функция является собственной для оператора дифференцирования, но собственное значение оказывается мнимым: $\ell = i$, что недопустимо, поскольку собственные значения оператора должны представлять собой возможные результаты измерения физической величины. Необходимо, чтобы собственные значения операторов были вещественными числами.

5) Если оператор выбрать в следующем виде $\hat{L} = i \frac{\partial}{\partial x}$, тогда $\Psi = e^{ix}$ будет являться собственной функцией этого оператора, а собственное значение будет вещественным: $\ell = -1$.

Обсудим подробнее физический смысл собственных значений операторов.

1. В квантовой механике постулируется, что совокупность собственных значений оператора \hat{L} ($\ell_1, \ell_2 \dots \ell_n$) указывает на возможные результаты измерения механической величины L . Этот постулат устанавливает связь между изображением величин операторами и опытом. Т.е. математика предсказывает набор собственных значений, а опыт проверяет эти предсказания.

2. Отсюда вытекает требование вещественности собственных значений.

3. Совокупность возможных собственных значений оператора некоторой физической величины образует спектр этой величины. Спектр может быть непрерывным, если возможны все значения величины L , и дискретным, когда возможны только отдельные значения $\ell_1, \ell_2 \dots \ell_n$. В этом случае говорят, что величина имеет квантованные значения.

4. Если данному собственному значению ℓ соответствуют несколько собственных функций, тогда физическая величина имеет определённое значение в каждом из этих состояний. В этом случае собственное значение является вырожденным. Число независимых собственных функций, соответствующих данному собственному значению, называется кратностью вырождения этого собственного значения. Например, если данной энергии E_0 соответствуют три квантовых состояния Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 , то этот энергетический уровень является трёхкратно вырожденным (рис. 24).

$$\frac{\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3}{E_0}$$

Рис. 24. Трёхкратное вырождение энергетического уровня.

2. Операторы координаты, импульса, момента импульса, энергии

Получим операторы основных механических величин (динамических переменных).

1. Оператор координаты.

Согласно (6.5) действие оператора координаты сводится к умножению волновой функции на соответствующую проекцию радиуса-вектора

$$\hat{x}\Psi = x\Psi, \hat{y}\Psi = y\Psi, \hat{z}\Psi = z\Psi, \hat{\mathbf{r}}\Psi = \vec{r}\Psi,$$

таким образом, оператор координаты совпадает с самой координатой

$$\boxed{\hat{x} = x, \hat{y} = y, \hat{z} = z, \hat{\mathbf{r}} = \vec{r}}. \quad (6.6)$$

2. Оператор импульса.

Продифференцируем волновую функцию де Бройля по x , после чего умножим обе части получившегося выражения на $(-i\hbar)$:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p_x \Psi \quad |(-i\hbar),$$

тогда получим

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi = p_x \Psi. \quad (6.7)$$

Из сравнения (6.7) с (6.5) следует, что выражение, стоящее перед волновой функцией, можно рассматривать как оператор проекции импульса на ось x , при этом

$$\hat{p}_x \Psi = p_x \Psi.$$

Аналогично можно получить операторы остальных проекций импульса и оператор импульса в векторной форме. Таким образом, оператор компоненты импульса сводится к дифференцированию по соответствующей координате:

$$\boxed{\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}, \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla}. \quad (6.8)$$

3) Оператор момента импульса.

В классической механике момент импульса определяется с помощью векторного произведения

$$\vec{K} = [\vec{r}\vec{p}] = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} = \vec{i}(yp_z - zp_y) + \vec{j}(zp_x - xp_z) + \vec{k}(xp_y - yp_x).$$

Переходя к операторам, получим

$$\hat{K}_x = (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (6.9)$$

$$\hat{K}_y = (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (6.10)$$

$$\hat{K}_z = (x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (6.11)$$

$$\hat{\vec{K}} = -i\hbar[\vec{r}\nabla]. \quad (6.12)$$

В некоторых задачах бывает удобно перейти от декартовой системы координат к сферической. В этом случае, например, оператор проекции момента импульса на ось z имеет вид

$$\hat{K}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (6.13)$$

4) Оператор энергии (гамильтониан).

Согласно (6.3) оператор полной механической энергии складывается из операторов кинетической и потенциальной энергии. Оператор кинетической энергии частицы получается путём замены импульса в классическом выражении на оператор импульса

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2.$$

Потенциальная энергия зависит только от координат x, y, z. Поэтому оператор потенциальной энергии в координатном представлении совпадает с самой функцией $U(x, y, z)$, т.е.

$$\hat{U}(x, y, z) = U(x, y, z).$$

Следовательно, оператор Гамильтона (гамильтониан) имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U. \quad (6.14)$$

С помощью найденного оператора энергии общее уравнение Шрёдингера (5.13) запишется следующим образом

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi. \quad (6.15)$$

Решая это уравнение, можно определить волновую функцию в любой произвольный момент времени $\Psi(x, y, z, t)$, а следовательно, и плотность вероятности $|\Psi(x, y, z, t)|^2$ обнаружить частицу в точке с координатами (x, y, z) в момент времени t .

Стационарное уравнение Шрёдингера с учётом (6.14) имеет вид

$$\hat{H}\Psi = E\Psi. \quad (6.16)$$

Запишем его подробно с учетом (6.14)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) + U\Psi = E\Psi. \quad (6.16')$$

В теории уравнений с частными производными уравнение такого типа называется уравнением на собственные значения. Таким образом, решение уравнения (6.16) – это задача на собственные значения оператора Гамильтона. Набор собственных значений гамильтониана \hat{H} образует энергетический спектр системы, а соответствующие собственные функции Ψ описывают состояния, в которых полная энергия системы имеет точно определенное значение. Как мы уже видели, такие состояния называются стационарными.

Заметим, что рассмотренные здесь операторы получены в координатном представлении квантового состояния, в котором волновая функция является функцией координат $\Psi(x, y, z)$. В квантовой механике используются также другие представления, например, импульсное (р-представление), энергетическое представление (E-представление), в которых операторы имеют другой вид.

3. Принцип суперпозиции состояний и линейность операторов в квантовой механике

Принцип суперпозиции состояний является одним из фундаментальных положений квантовой механики. Введение его обусловлено необходимостью включения в теорию волновых свойств микрообъектов (интерференции и дифракции). Как и во всякой волновой теории, вводится суперпозиция самих волновых полей, а не их интенсивностей. Принцип суперпозиции формулируется следующим образом:

1) Если система (частица или совокупность частиц) может находиться в состояниях, описываемых волновыми функциями Ψ_1 и Ψ_2 , то она может находиться и в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\boxed{\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2}, \quad (6.17)$$

где c_1 и c_2 — произвольные комплексные числа.

2) В случае произвольного числа состояний, описываемых функциями $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots, \Psi_n$, система может находиться в состоянии, являющемся линейной комбинацией этих функций

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n. \quad (6.18)$$

Для того чтобы лучше понять суть квантово-механического принципа суперпозиции, проанализируем результаты мысленных экспериментов, следуя Дираку [13] и Фейнману [30].

1) Интерференция электронов на двух щелях.

Пусть сначала открыта первая щель. Волновую функцию электрона, прошедшего через эту щель, обозначим через $\Psi_1(x)$. Тогда плотность вероятности нахождения электрона в точке с координатой x будет

$$w_1(x) = |\Psi_1(x)|^2. \quad (6.19)$$

Аналогично, если закрыта первая щель и открыта вторая, то

$$w_2(x) = |\Psi_2(x)|^2. \quad (6.20)$$

Теперь откроем обе щели. Если бы электроны вели себя как обычные частицы, то результирующее распределение вероятностей получилось бы простым сложением (6.19) и (6.20)

$$w_{12}(x) = w_1(x) + w_2(x) = |\Psi_1(x)|^2 + |\Psi_2(x)|^2. \quad (6.21)$$

Однако при этом интерференционная картина не возникает, что противоречит опыту.

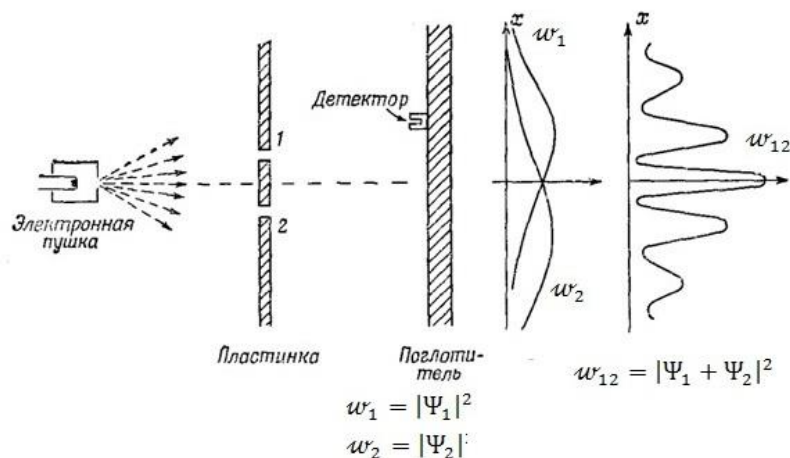


Рис. 25. Интерференция электронов на двух щелях

Если для объяснения интерференции предположить, что складываются сами амплитуды вероятности (т.е. сами Ψ – функции)

$$\Psi_{12}(x) = \Psi_1(x) + \Psi_2(x), \quad (6.22)$$

тогда результирующая плотность вероятности будет иметь вид

$$w_{12}(x) = |\Psi_{12}(x)|^2 = |\Psi_1(x) + \Psi_2(x)|^2. \quad (6.23)$$

В этом случае получится типичное интерференционное распределение вероятности:

$$\begin{aligned} w_{12}(x) &= |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + 2|\Psi_1| \cdot |\Psi_2| \cdot \cos(\varphi_1 - \varphi_2) = \\ &= w_1 + w_2 + 2\sqrt{w_1 w_2} \cdot \cos(\varphi_1 - \varphi_2), \end{aligned} \quad (6.24)$$

где φ_1 и φ_2 – фазы волновых функций Ψ_1 и Ψ_2 .

Таким образом, распределение вероятностей в двухщелевом эксперименте не равно сумме однощелевых вероятностей. При этом сам электрон не «раздваивается» согласно двум возможностям, а проходит только через одну щель. Картина интерференции относится не к самой частице, а к волновой функции и, следовательно, к распределению вероятностей. Взаимодействие электрона с щелями носит вероятностный характер. В суперпозиции состояний Ψ_1 и Ψ_2 (6.22) необходимо учесть статистический вес каждого из них, т.е.

$$\Psi_{12}(x) = c_1 \Psi_1(x) + c_2 \Psi_2(x) . \quad (6.25)$$

С вероятностью $|c_1|^2$ электрон проходит через первую щель и с вероятностью $|c_2|^2$ – через вторую щель, при этом сумма вероятностей

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$

2) Поляризация фотонов.

Рассмотрим пучок света, проходящий через кристалл турмалина, который обладает способностью пропускать свет, поляризованный в направлении, перпендикулярном к оптической оси кристалла (при этом колебания вектора напряжённости электрического поля происходят вдоль оптической оси, а колебания вектора магнитной напряженности – перпендикулярно оптической оси), рис. 26.

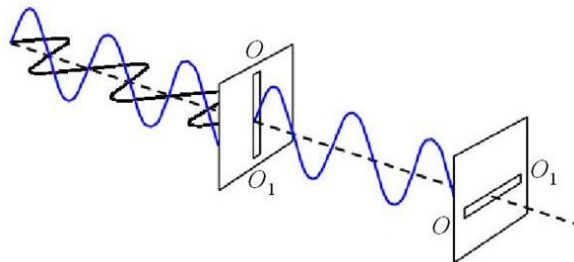


Рис. 26. Поляризация света

Если свет поляризован под углом α к оси, то согласно классической электродинамике через кристалл пройдёт часть пучка в соответствии с формулой

для интенсивности $\mathcal{I} = \mathcal{I}_0 \sin^2 \alpha$, поскольку перпендикулярная составляющая вектора магнитной напряженности поля световой волны пропорциональна $\sin \alpha$.

Теперь попытаемся понять эти результаты, рассматривая свет как пучок фотонов. Очевидно, что каждый фотон, поляризованный перпендикулярно оси, беспрепятственно пройдёт через кристалл, а фотон, поляризованный параллельно оси, поглотится кристаллом. А что произойдёт в случае, когда фотон поляризован наклонно (под углом к оптической оси), рис. 27?

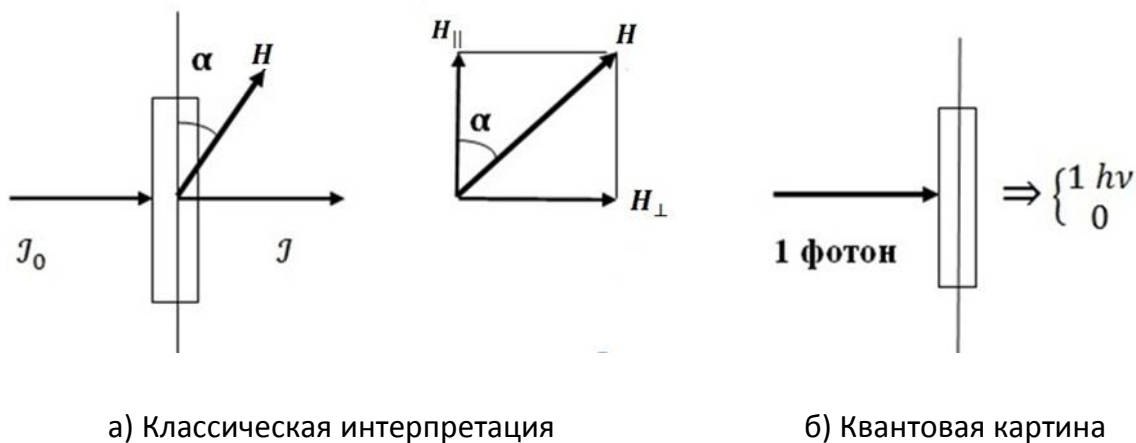


Рис. 27. Поляризация фотонов

Тогда нельзя дать определённого ответа на вопрос, пройдёт ли фотон через кристалл или будет задержан в нём. Вероятность прохождения фотона будет заключена между нулём и единицей. При большом числе опытов число случаев обнаружения фотона составит долю $\sin^2 \alpha$ от общего числа опытов. Можно сказать, что фотон с вероятностью $\sin^2 \alpha$ пройдёт через кристалл, если он поляризован перпендикулярно оси, и с вероятностью $\cos^2 \alpha$ поглотится кристаллом. Если, например, угол равен 45° , то вероятность прохождения равна $1/2$. Это означает, что из 100 фотонов, линейно поляризованных в данном направлении, в среднем только 50 пройдут сквозь кристалл.

Таким образом, в результате взаимодействия фотона с кристаллом всегда будет обнаруживаться либо целый фотон, либо ничего. Целый фотон обнаружится тогда, когда он будет поляризован перпендикулярно оптической оси. Если фотон поляризован параллельно оптической оси, то он будет поглощён кристаллом. Но дробной части фотона не обнаружится никогда.

С точки зрения квантовой механики, необходимо допустить, что состояние фотона до взаимодействия с кристаллом есть суперпозиция двух состояний поляризации

$$\Psi_{\text{фотона}} = c_1 \Psi_{\perp} + c_2 \Psi_{\parallel} . \quad (6.26)$$

В результате наблюдения фотон делает внезапный скачок от частичного пребывания в обоих состояниях поляризации к пребыванию в одном из состояний. Т.е. процесс измерения разрушает суперпозицию. В какое из двух состояний поляризации произойдёт скачок, – предсказать однозначно нельзя. В общем случае с вероятностью $|c_1|^2$ фотон будет иметь перпендикулярную поляризацию и, следовательно, будет обнаружен после прохождения им кристалла, и с вероятностью $|c_2|^2$ он будет иметь параллельную поляризацию и, следовательно, будет поглощён.

3) Интерференция фотонов.

Пучок света, попадая в интерферометр, расщепляется на две компоненты (1 и 2), которые затем интерферируют друг с другом (рис. 28). Это явление, хорошо объясняемое волновой теорией света, обнаруживает трудности в его интерпретации на основе корпускулярных представлений, если рассматривать свет как поток фотонов.

Предположим, что пучок света состоит из одного фотона. Что произойдёт с ним при прохождении через интерферометр? По аналогии с предыдущим примером мы должны допустить, что фотон должен находиться в состоянии, которое представляет собой суперпозицию двух состояний, соответствующих двум компонентам расщеплённого пучка. Если мы определим энергию одной из компонент, то в результате получим либо целый фотон, либо ничего. Фотон внезапно окажется целиком в одном из пучков. В каком из двух пучков будет найден фотон, – предсказать невозможно, можно лишь вычислить вероятность каждого результата.

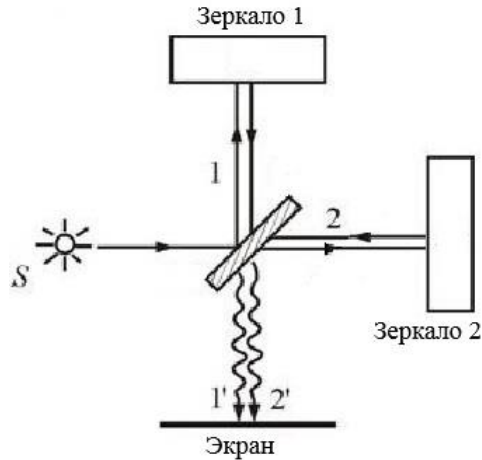


Рис. 28. Интерференция фотонов

Таким способом квантовая механика позволяет «примирить» корпускулярную и волновую точки зрения на природу света. Каждое состояние движения фотона связывается с некоторой волновой функцией, которая дает информацию о вероятности того, что при измерении положения фотона мы обнаружим его в том или ином месте.

Важно отметить, что волновая функция дает сведения о вероятности нахождения одного фотона, а не о вероятном числе фотонов в данном месте. Чтобы понять это утверждение, рассмотрим пучок света, состоящий из большого числа фотонов, который расщепляется на две компоненты с одинаковой интенсивностью. Если предположить, что интенсивность пучка связана с вероятным числом фотонов, то в каждую компоненту попадет половина от общего числа фотонов. Далее надо потребовать, чтобы при интерференции этих компонент каждый фотон из одной компоненты мог интерферировать с фотоном в другой компоненте. Но тогда эти два фотона либо будут уничтожаться, либо превращаться в четыре фотона, что противоречит закону сохранения энергии. Следовательно, волновая функция должна быть связана с вероятностями для одного фотона. Каждый фотон входит отчасти в каждую из двух компонент. Таким образом, каждый фотон интерферирует с самим собой. Интерференции между разными фотонами не происходит.

Конечно, с точки зрения привычных физических понятий классической физики очень сложно объяснить рассмотренные выше примеры. Как пишет П.А.М. Дирак в своей монографии «Принципы квантовой механики» [13], «в классическом смысле слова нельзя представить себе, что система находится частично в одном состоянии, а частично в другом и что это эквивалентно тому, что система целиком находится в некотором третьем состоянии. Здесь вводится совершенно новая идея, к которой нужно привыкнуть и на основе которой следует далее строить точную математическую теорию, не имея при этом детальной классической картины».

Очевидно, что процесс суперпозиции напоминает процесс сложения. Поэтому состояния следует связать с такими математическими величинами, которые можно складывать между собой, образуя новые математические величины. Наиболее известными величинами такого рода являются векторы.

Для математической формулировки принципа суперпозиции в квантовой механике Дирак предложил каждому квантовому состоянию сопоставить вектор состояния. Этот вектор называется кет-вектором и обозначается символом $|\Psi\rangle$. Каждому кет-вектору сопоставляется сопряжённый ему вектор, который называется бра-вектором и обозначается символом $\langle\Psi|$.

$$\begin{aligned} \Psi &\equiv |\Psi\rangle, \text{ кет-вектор;} \\ \Psi^+ &\equiv |\Psi\rangle^+ \equiv \langle\Psi|, \text{ бра-вектор.} \end{aligned}$$

Совокупность всех возможных кет-векторов образует абстрактное комплексное векторное пространство бесконечного числа измерений. Это многомерное пространство называется гильбертовым пространством (в честь выдающегося математика Давида Гильберта). Названия «бра» и «кет» соответствуют двум частям английского слова bracket – «скобка».

Вектор состояния является одним из основных понятий квантовой механики. Задание его полностью определяет состояние квантовой системы.

Используя обозначения Дирака, можно переписать принцип суперпозиции (6.17) в следующем виде

$$|\Psi\rangle = c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle. \quad (6.27)$$

Дирак пишет: «Любое состояние можно рассматривать как результат суперпозиции двух или многих других состояний и притом бесконечным числом способов. Представление состояния в виде результата суперпозиции некоторого числа других состояний – это математическая процедура, которая всегда возможна и не имеет отношения к физическим условиям. Эта процедура аналогична разложению волны на компоненты Фурье. Будет ли такое разложение полезно, это зависит от конкретных физических условий в рассматриваемой задаче».

Имеется глубокое различие между суперпозицией в квантовой механике и суперпозицией в классической теории.

1) В случае классической системы, например, колебания струны, суперпозиция состояния с самим собой приводит к другому состоянию с новой амплитудой (рис. 29):

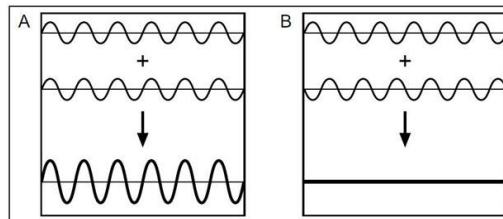


Рис. 29. Классическая суперпозиция колебаний: А – взаимное увеличение результирующей амплитуды при совпадении фаз колебаний; В – взаимное гашение колебаний, находящихся в противофазе

В квантовой механике суперпозиция состояния с самим собой не даёт нового состояния:

$$|\Psi\rangle = c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_1\rangle = (c_1 + c_2)|\Psi_1\rangle. \quad (6.28)$$

Таким образом, состояние определяется только направлением вектора, а длина его несущественна.

2) В классической волновой теории возможно состояние покоя, когда амплитуда колебаний равна нулю (рис. 29, В). В квантовой механике нет аналогичного состояния, поскольку при нулевой амплитуде $\Psi = 0$, т.е. такое состояние отсутствует.

3) Неклассический характер принципа суперпозиции в квантовой механике становится очевидным при анализе результатов измерения. Пусть в результате измерения некоторая физическая величина L в состоянии $|\Psi_1\rangle$ принимает значение ℓ_1 , а в состоянии $|\Psi_2\rangle$ – значение ℓ_2 . Каков будет результат измерения этой величины в состоянии, являющемся суперпозицией двух указанных состояний $|\Psi\rangle = c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle$? В этом состоянии всегда будет получаться либо ℓ_1 , либо ℓ_2 . Результат измерения зависит от относительного веса каждого состояния в суперпозиции (т.е. от вероятностей $|c_1|^2$ и $|c_2|^2$).

Из рассмотренных выше примеров следует, что квантовый принцип суперпозиции требует неопределённости результатов измерения, чтобы его можно было разумно истолковать физически. В квантовой механике можно говорить лишь о вероятностях каждого возможного исхода эксперимента, выполняемого над системой, находящейся в данном квантовом состоянии.

Такая картина соответствует копенгагенской интерпретации квантовой механики, разработанной Бором, Гейзенбергом и др. Согласно этой точке зрения в процессе измерения происходит скачок от состояния, описываемого суперпозицией, к состоянию, описываемому одной из компонент этой суперпозиции. Т.е. происходит выбор одной компоненты и исчезновение остальных. Это называется редукцией состояния, или коллапсом волновой функции (постулат редукции фон Неймана).

Из принципа суперпозиции следует, что все уравнения, которым удовлетворяет волновая функция Ψ , должны быть линейными по Ψ . Только для линейных уравнений сумма решений с произвольными коэффициентами является также решением. Отсюда вытекает и линейность операторов, используемых в квантовой механике.

Дадим определение линейного оператора. Оператор \hat{L} называется линейным, если он удовлетворяет следующим условиям:

$$\boxed{\begin{cases} \hat{L}c\Psi = c\hat{L}\Psi \\ \hat{L}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\hat{L}\Psi_1 + c_2\hat{L}\Psi_2, \end{cases}} \quad (6.29)$$

где Ψ_1 и Ψ_2 – две произвольные функции, а c, c_1, c_2 – произвольные постоянные.

Примером линейного оператора является оператор $\frac{\partial}{\partial x}$ и, следовательно, оператор импульса $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Действительно,

$$\begin{aligned} \hat{p}_x(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = -i\hbar \left(c_1 \frac{\partial}{\partial x} \Psi_1 + c_2 \frac{\partial}{\partial x} \Psi_2 \right) = \\ &= c_1 \hat{p}_x \Psi_1 + c_2 \hat{p}_x \Psi_2. \end{aligned}$$

Нетрудно показать, что все рассмотренные ранее операторы являются линейными.

Оператор возведения в квадрат не является линейным. В самом деле,

$$\hat{L}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1^2\Psi_1^2 + c_2^2\Psi_2^2 + 2c_1\Psi_1c_2\Psi_2 \neq c_1\Psi_1^2 + c_2\Psi_2^2.$$

Принципу суперпозиции удовлетворяет уравнение Шрёдингера. Действительно, пусть имеются два решения уравнения Шрёдингера

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} &= \hat{H}\Psi_1, \\ i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} &= \hat{H}\Psi_2. \end{aligned}$$

Тогда для состояния $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ будем иметь

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1 i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} + c_2 i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = c_1 \hat{H}\Psi_1 + c_2 \hat{H}\Psi_2 = \\ &= \hat{H}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = \hat{H}\Psi, \end{aligned}$$

то есть

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi.$$



**Поль Адриен Морис Дирак
(1902–1984)**

Выдающийся английский физик-теоретик, один из создателей квантовой механики.

Разработал векторную формулировку квантовой механики (1926–1927 гг.).

Применил квантовую теорию к электромагнитному полю, заложив основы квантовой электродинамики.

Создал квантовую статистику частиц с полуцелым спином (1926 г.).

Разработал метод вторичного квантования (1927 г.).

Построил релятивистскую квантовую механику (1928 г.), предсказал существование позитрона.

Предсказал возможность существования одиночных магнитных зарядов – монополей (1931 г.).

Совместно со Шрёдингером награждён Нобелевской премией в 1933 г.

Член Лондонского королевского общества, а также ряда академий наук мира.

П. Дирак:

«Физические законы должны обладать математической красотой».

«Оказывается, одна из основных особенностей природы заключается в том, что законы фундаментальной физики описываются очень изящными и мощными математическими теориями. Для понимания этих теорий нужно быть математиком высокого уровня. Вы можете удивляться: почему Природа устроена таким образом? Единственное, что можно ответить на современном уровне знаний – Природа таким образом сконструирована. Остается только принять это».

«Главная задача физической науки состоит не в том, чтобы снабжать нас наглядными картинками, а в том, чтобы формулировать законы, управляющие явлениями, и использовать эти законы для открытия новых явлений. Если наглядная картина существует, то тем лучше; однако существует она или нет – это лишь второстепенный вопрос».

Абдус Салам, лауреат Нобелевской премии по физике 1979 г.:

«Поль Адриен Морис Дирак — без сомнения, один из величайших физиков этого, да и любого другого столетия. В течение трех решающих лет — 1925, 1926 и 1927 — своими тремя работами он заложил основы, во-первых, квантовой физики в целом, во-вторых, квантовой теории поля и, в-третьих, теории элементарных частиц... Ни один человек, за исключением Эйнштейна, не оказал столь определяющего влияния за столь короткий период времени на развитие физики в этом столетии».

4. Суперпозиция состояний и парадокс кота Шрёдингера

В 1935 г. Шрёдингер опубликовал статью «Современное состояние квантовой механики», в которой привёл мысленный эксперимент, получивший название «парадокс кота Шрёдингера». Таким способом он хотел показать, что попытки обобщения квантового принципа суперпозиции на классические объекты приводят к парадоксам. Суть эксперимента состоит в следующем. В стальном ящике заключён кот (в статье Шрёдингера это была кошка, но традиционно при обсуждении парадокса упоминается кот). Там же находится ампула с ядом, которая может быть разбита посредством механизма, запускающегося при распаде одного радиоактивного атома. Радиоактивный распад подчиняется экспоненциальному вероятностному закону. За время, значительно превышающее период полураспада, распад заведомо произойдёт. При этом срабатывает счётчик Гейгера, включается устройство, разбивающее ампулу с ядом, и кот умирает.

Однако в момент времени, сравнимый с периодом полураспада, атом находится в состоянии суперпозиции нераспавшегося (Ψ_1) и распавшегося (Ψ_2) атома

$$\Psi_{\text{атома}} = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2. \quad (6.30)$$

Тогда и состояние кота в этот момент должно представлять собой суперпозицию живого и мёртвого кота

$$\Psi_{\text{кота}} = c_1\Psi_{\text{живой}} + c_2\Psi_{\text{мёртвый}}. \quad (6.31)$$

Парадокс состоит в следующем. Кот находится между жизнью и смертью до тех пор, пока не будет подвергнут прямому наблюдению. Пока ящик не вскрыт, то согласно квантовой механике система (атом + кот) находится в суперпозиции двух состояний (нераспавшийся атом + живой кот) и (распавшийся атом + мёртвый кот), т.е. должна иметь место суперпозиция живого и мёртвого кота (на 50% кот жив и на 50% мёртв одновременно), но, открыв ящик, т.е. совершив измерение, мы обнаружим либо живого, либо мёртвого кота. Суперпозиции живого и мёртвого кота ещё никому не удалось наблюдать.



Рис. 30. Эрвин Шрёдингер и его мысленный эксперимент «Шрёдингеровский кот»

При первом знакомстве с этим мысленным экспериментом кажется, что всё это противоречит «здравому смыслу»: как это кот может быть жив и мёртв одновременно только потому, что мы на него не смотрим? (Аналогичный вопрос задавал Эйнштейн: «Неужели Луна существует только потому, что на неё смотрит мышь?»).

Причина ненаблюдаемости суперпозиции макроскопических состояний состоит в том, что при взаимодействии с внешним миром состояние суперпозиции легко разрушается. Суперпозиция как свойство микромира требует крайней степени «уединённости» для своего проявления. А кота нельзя отделить от окружающей среды. Он находится в контакте с воздухом, ящиком, сам является источником инфракрасного излучения, подвержен гравитационному воздействию со стороны Земли, действию пронизывающих его космических лучей и т.д. Достаточно столкновения одной-единственной молекулы воздуха с его усами, чтобы суперпозиция волновых функций живого и мёртвого кота разрушилась. Т.е. ещё до того, как мы вскроем ящик, кот уже будет жив или мёртв.

Для того чтобы кот был жив и мёртв одновременно, необходимо, чтобы компоненты его волновой функции (6.31) были когерентны по отношению друг к другу. При взаимодействии системы с окружением её состояние запутывается с состоянием окружения, в результате чего возникает потеря когерентности системы, утрачивается информация об относительных фазах отдельных компонент

волновой функции (о коэффициентах c_1 и c_2). Именно декогеренция приводит к ненаблюдаемости в природе суперпозиции живых и мёртвых котов (Приложение III).

В 1957 г. Хью Эверетт предложил многомировую интерпретацию квантовой механики (Приложение VI), в которой все компоненты квантовой суперпозиции «выживают» в процессе измерения (в отличие от копенгагенской трактовки с постулатом редукции состояния, когда после измерения остается только одно из альтернативных состояний, а остальные исчезают). В картине Эверетта квантовый мир представляет собой сосуществование параллельных классических альтернатив (или параллельных миров). Кот может быть живым в одном мире Эверетта и мертвым – в другом. Эти миры сосуществуют, они параллельны. А наблюдатель видит всего лишь одну альтернативу (один из возможных результатов измерения) – либо живого, либо мертвого кота, поскольку его сознание разделяет альтернативы (воспринимая субъективно одну из альтернатив, человек не может в то же самое время воспринимать остальные). Подробнее с эвереттовской интерпретацией квантовой механики можно познакомиться в книге Б.М. Менского [22].

Хотя состояния типа «шрёдингеровского кота» в макросистемах (состоящих из огромного числа частиц) не наблюдаемы, но уже достигнуты значительные теоретические и экспериментальные успехи в изучении и создании подобных состояний в мезоскопических системах (системах с масштабами, промежуточными между макроскопическим и микроскопическим).

Суперпозиция квантовых состояний является базовым понятием в проблеме квантовых вычислений и квантовых компьютеров. Классические компьютеры оперируют с числами. При этом информация зашифровывается в виде 0 и 1. Каждый бит памяти может принимать одно из этих двух значений. Сочетание двух битов может принимать четыре значения 00, 11, 01 или 10.

Квантовый компьютер оперирует с состояниями. Простейшая система с двумя возможными состояниями описывается с помощью квантового бита (q-бит, qubit). Квантовый бит информации – это состояние квантовой системы с двумя

возможными базовыми состояниями $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Общее состояние такой системы есть суперпозиция нуля и единицы

$$|\Psi\rangle = c_1|0\rangle + c_2|1\rangle,$$

где c_1 и c_2 – комплексные амплитуды состояний, при этом $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$.

Помимо вероятностей $|c_1|^2$ и $|c_2|^2$ заполнения базисных состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$, состояние кубита характеризуется когерентными (или интерференционными) слагаемыми в вероятности состояния $|\Psi\rangle$, которые определяются произведениями комплексных амплитуд $c_1 c_2^*$ и $c_1^* c_2$. Состояние квантового бита, в отличие от классического, может изменяться не только путем изменения вероятностей базисных состояний, но и более тонко путем изменения амплитуд состояний c_1 и c_2 , что соответствует поворотам вектора состояния $|\Psi\rangle$ в гильбертовом двухмерном пространстве состояний.

Физическими системами, реализующими кубиты, могут быть любые объекты с двумя квантовыми состояниями: поляризационные состояния фотонов, основное и возбуждённое состояния атома, проекции спина «вверх» и «вниз» атомного ядра, направление тока в сверхпроводящем кольце и др.

В 1982 г. американский физик-теоретик, нобелевский лауреат Ричард Фейнман впервые обратил внимание на возможность построения процессора, работающего на основе квантово-механических принципов. С тех пор проблемы создания квантовых компьютеров превратились в важнейшие физические проблемы. Среди них – проблема сохранения когерентности суперпозиционных состояний (противодействие декогеренции), или проблема отыскания конкретных процессов, выполняющих логические операции.

Лекция 7. Теоремы о собственных функциях и собственных значениях линейных самосопряжённых (эрмитовых) операторов

1. Эрмитовы операторы и вещественность их собственных значений

Каждому линейному оператору \hat{L} можно сопоставить другой линейный оператор \hat{L}^+ , сопряжённый данному, который удовлетворяет условию

$$\int_V \Psi_1^* \hat{L} \Psi_2 dV = \int_V (\hat{L}^+ \Psi_1)^* \Psi_2 dV, \quad (7.1)$$

где звёздочкой обозначаются, как и раньше, комплексно-сопряжённые величины. Оператор, сопряжённый с оператором \hat{L} , обозначен с помощью креста наверху (следует различать оператор \hat{L}^+ , сопряжённый с оператором \hat{L} , и комплексно-сопряжённый оператор \hat{L}^*). Интегрирование ведётся по всей области изменения переменных, dV – элемент объёма этой области. Волновые функции, входящие в (7.1), должны удовлетворять граничным условиям и, в первую очередь, требованию конечности: $\Psi(+\infty) = \Psi(-\infty) = 0$.

Если оператор \hat{L} совпадает со своим сопряжённым оператором $\hat{L}^+ = \hat{L}$, то такой оператор называется самосопряжённым или эрмитовым. Такое название оператора введено в честь выдающегося французского математика Шарля Эрмита (1822–1901).

Таким образом, оператор называется эрмитовым, если выполняется условие

$$\boxed{\int_V \Psi_1^* \hat{L} \Psi_2 dV = \int_V (\hat{L} \Psi_1)^* \Psi_2 dV}. \quad (7.2)$$

Правую часть этого равенства можно переписать так:

$$\int_V (\hat{L} \Psi_1)^* \Psi_2 dV = \int_V \Psi_2 (\hat{L} \Psi_1)^* dV.$$

Поэтому условие эрмитовости (7.2) принимает вид

$$\int_V \Psi_1^* \hat{L} \Psi_2 dV = \int_V \hat{L}^* \Psi_1^* \Psi_2 dV = \int_V \Psi_2 \hat{L}^* \Psi_1^* dV. \quad (7.3)$$

Рассмотрим примеры.

1) Пусть оператор \hat{L} является оператором дифференцирования: $\hat{L} = \frac{\partial}{\partial x}$.

Подставим его в левую часть условия (7.2), получим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} dx.$$

Проинтегрируем это выражение по частям

$$u = \Psi_1^*, \quad dv = \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} dx;$$

$$du = \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} dx, \quad v = \Psi_2;$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_2 dx = \Psi_1^* \Psi_2 \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} \Psi_2 dx.$$

Таким образом, условие самосопряжённости (7.2) в этом случае не выполняется.

2) Пусть оператор \hat{L} имеет вид $\hat{L} = i \frac{\partial}{\partial x}$. Подставляя его в левую часть условия (7.2) и интегрируя по частям, будем иметь

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* i \frac{\partial}{\partial x} \Psi_2 dx &= \\ &= i \Psi_1^* \Psi_2 \Big|_{-\infty}^{+\infty} - i \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(i \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x} \right)^* \Psi_2 dx. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Таким образом, в этом случае критерий эрмитовости (7.2) выполняется.

Из (7.4) следует, что самосопряжёнными будут также операторы импульса $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ (аналогично \hat{p}_y, \hat{p}_z) и проекций момента импульса $\hat{K}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$ (аналогично две другие проекции \hat{K}_y, \hat{K}_z).

Определение эрмитового оператора можно записать в матричной форме. Для произвольных функций Ψ_m и Ψ_n условие (7.3) имеет вид

$$\int_V \Psi_m^* \hat{L} \Psi_n dV = \int_V \hat{L}^* \Psi_m^* \Psi_n dV = \int_V \Psi_n \hat{L}^* \Psi_m^* dV. \quad (7.5)$$

В левой части этого выражения стоит матричный элемент, который в обозначениях Дирака можно записать в виде $L_{mn} = \langle m | \hat{L} | n \rangle$. В правой части (7.5) содержится элемент матрицы $L_{nm}^* = \langle n | \hat{L} | m \rangle^*$. Поэтому из (7.5) следует

$$\langle m | \hat{L} | n \rangle = \langle n | \hat{L} | m \rangle^* \quad (7.6)$$

Операция, при которой меняются местами строки и столбцы матрицы, называется транспонированием матрицы. Транспонированная матрица обозначается с помощью тильды (\sim), при этом

$$\tilde{L}_{mn} = L_{nm}.$$

Учитывая (7.6), можно записать определение эрмитовой матрицы в виде

$$L_{mn} = L_{nm}^*. \quad (7.7)$$

Из (7.7) следует, что если взять матрицу, комплексно сопряжённую транспонированной, т.е. \tilde{L}^* , то получим матрицу, сопряжённую исходной, которая обозначается через L^+ . Её элементы определяются формулой

$$L_{mn}^+ = \tilde{L}_{mn}^* = L_{nm}^*. \quad (7.8)$$

Таким образом, эрмитовая или самосопряжённая матрица определяется выражением

$$\boxed{L = L^+ = \tilde{L}^*}. \quad (7.9)$$

В частном случае для матрицы 2×2

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

сопряжённая матрица имеет вид

$$\hat{L}^+ = \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* \end{pmatrix}.$$

Она получилась из исходной матрицы путём транспонирования и замены каждого элемента на комплексно-сопряжённый.

Рассмотрим примеры.

1) Пусть задана матрица

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.10)$$

Матрица, комплексно сопряжённая данной, имеет вид

$$\hat{L}^* = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.11)$$

Из матрицы (7.11) образуем транспонированную матрицу, тогда получим матрицу, сопряжённую исходной (7.10)

$$\hat{L}^+ = \hat{L}^* = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.12)$$

Из сравнения (7.10) и (7.12) видно, что $\hat{L} \neq \hat{L}^+$, т.е. матрица (7.10) не является эрмитовой.

2) Пусть матрица имеет вид

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (7.13)$$

(это одна из трёх спиновых матриц Паули). Найдём матрицу, комплексно сопряжённую к исходной

$$\hat{\sigma}_y^* = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix},$$

затем транспонируем полученную матрицу

$$\tilde{\sigma}_y^* = \sigma_y^+ = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.14)$$

Из сравнения (7.13) и (7.14) следует, что $\hat{\sigma}_y = \hat{\sigma}_y^+$, т.е. матрица $\hat{\sigma}_y$ является само-сопряжённой (эрмитовой).

Заметим, что матрица \hat{C}^+ , сопряжённая произведению \hat{C} двух матриц \hat{A} и \hat{B} , записывается в виде

$$\hat{C}^+ = (\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+. \quad (7.15)$$

Действительно, согласно определению сопряжённой матрицы (7.8)

$$C_{mn}^+ = C_{nm}^* = \sum_k A_{nk}^* B_{km}^* = \sum_k \tilde{B}_{mk}^* \tilde{A}_{kn}^* = \sum_k B_{mk}^+ A_{kn}^+.$$

Здесь использовано правило умножения матриц: чтобы найти матричный элемент C_{mn} матрицы, представляющей произведение операторов \hat{A} и \hat{B} , необходимо элементы m -й строки матрицы A умножить на элементы n -го столбца матрицы B и сложить.

Докажем следующую теорему.

Теорема 1: собственные значения эрмитовых операторов являются вещественными (или действительными) числами.

Пусть Ψ – собственная функция, а ℓ – собственное значение оператора \hat{L} :

$$\hat{L}\Psi = \ell\Psi. \quad (7.16)$$

Необходимо доказать, что

$$\boxed{\ell = \ell^*}. \quad (7.17)$$

Доказательство. Умножим (7.16) слева на волновую функцию Ψ^* и проинтегрируем по всему объёму

$$\int_V \Psi^* \hat{L}\Psi dV = \int_V \Psi^* \ell\Psi dV = \ell \int_V \Psi^* \Psi dV. \quad (7.18)$$

С другой стороны, согласно условию эрмитовости (7.2)

$$\int_V \Psi^* \hat{L}\Psi dV = \int_V (\hat{L}\Psi)^* \Psi dV = \ell^* \int_V \Psi^* \Psi dV = \ell^* \int_V \Psi^* \Psi dV. \quad (7.19)$$

Из сравнения (7.18) с (7.19) видно, что левые части этих формул одинаковы, поэтому равны и их правые части: $\ell = \ell^*$, т.е. ℓ – действительное число, что и требовалось доказать.

2. Ортогональность и нормировка собственных функций

Теорема 2: собственные функции самосопряжённых операторов, принадлежащие различным собственным значениям, взаимно ортогональны.

Пусть Ψ_m и Ψ_n – собственные функции оператора \hat{L} , т.е.

$$\hat{L}\Psi_n = \ell_n\Psi_n, \quad (7.20)$$

$$\hat{L}\Psi_m = \ell_m\Psi_m. \quad (7.21)$$

Необходимо доказать, что

$$\int_V \Psi_m^* \Psi_n dV = 0, \text{ при } m \neq n. \quad (7.22)$$

Доказательство. Умножим (7.20) слева на Ψ_m^* и проинтегрируем по всему объёму

$$\int_V \Psi_m^* \hat{L}\Psi_n dV = \ell_n \int_V \Psi_m^* \Psi_n dV. \quad (7.23)$$

С другой стороны, согласно определению эрмитова оператора (7.2)

$$\int_V \Psi_m^* \hat{L}\Psi_n dV = \int_V (\hat{L}\Psi_m)^* \Psi_n dV = \ell_m^* \int_V \Psi_m^* \Psi_n dV, \quad (7.24)$$

где $\ell_m^* = \ell_m$ согласно теореме 1 (7.17). Вычитая из (7.23) выражение (7.24), получаем

$$0 = (\ell_n - \ell_m) \int_V \Psi_m^* \Psi_n dV,$$

откуда следует (7.22). Это условие можно записать с помощью бра- и кет-векторов

$$\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = 0, \text{ или } \langle m | n \rangle = 0. \quad (7.25)$$

Теперь рассмотрим случай, когда $\Psi_m = \Psi_n$. Тогда

$$\int_V \Psi_n^* \Psi_n dV = \int |\Psi_n|^2 dV = \int dW = 1,$$

то есть

$$\boxed{\int_V \Psi_n^* \Psi_n dV = 1} . \quad (7.26)$$

Условие (7.26) есть условие нормировки волновой функции в случае дискретного спектра собственных значений. Объединяя (7.22) и (7.26), получим условие ортонормировки

$$\boxed{\int_V \Psi_m^* \Psi_n dV = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{при } m = n, \\ 0 & \text{при } m \neq n \end{cases}} , \quad (7.27)$$

где δ_{mn} – дельта-символ Кронекера.

Таким образом, собственные функции эрмитового оператора образуют ортонормированную систему. Но система собственных функций является не только ортогональной, но и полной системой. Она образует ортонормированный базис, по которому может быть разложена любая стандартная функция. При этом роль собственных функций аналогична роли базисных векторов в линейной алгебре (рис. 31).

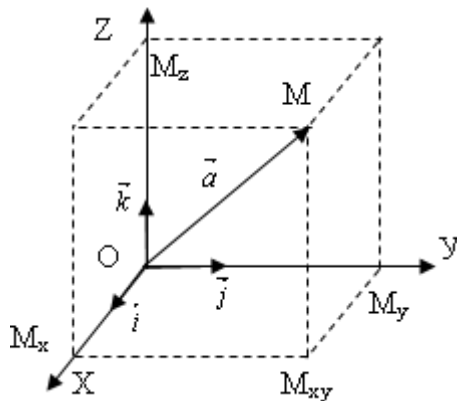


Рис. 31. Разложение вектора по базису

То есть любую стандартную функцию можно представить в виде ряда по этим собственным функциям:

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 + \dots + c_n \Psi_n. \quad (7.28)$$

Используя условие ортонормировки, можно найти любой коэффициент c_n ряда. Например, для нахождения коэффициента c_2 умножим (7.28) на Ψ_2^* и проинтегрируем по всему пространству

$$\int_V \Psi_2^* \Psi dV = c_1 \int_V \Psi_2^* \Psi_1 dV + c_2 \int_V \Psi_2^* \Psi_2 dV + c_3 \int_V \Psi_2^* \Psi_3 dV + \dots$$

Согласно (7.27) все интегралы в правой части обращаются в нуль, кроме второго, который равен единице, т.е.

$$c_2 \int_V \Psi_2^* \Psi_2 dV = c_2 \cdot 1 = c_2,$$

поэтому

$$c_2 = \int_V \Psi_2^* \Psi dV.$$

Аналогично для любого коэффициента ряда

$$c_n = \int_V \Psi_n^* \Psi dV = \langle \Psi_n | \Psi \rangle. \quad (7.29)$$

Получим условие полноты ортонормированного базиса. Выражение (7.28) с учётом (7.29) можно записать в виде

$$|\Psi\rangle = \sum_n |\Psi_n\rangle c_n = \sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle. \quad (7.30)$$

Из (7.30) следует, что

$$|\Psi\rangle = \left(\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n | \right) |\Psi\rangle.$$

Таким образом, получаем условие полноты системы собственных функций

$$\boxed{\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| = \hat{I}}. \quad (7.31)$$

Это критерий того, что система собственных функций достаточна для представления в виде суперпозиции (7.28) любой стандартной функции без добавления к системе какой-либо функции, не являющейся собственной функцией оператора \hat{L} .

Следует обратить внимание на то, что в отличие от скалярного произведения $\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle$, выражение

$$\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|$$

представляет собой единичный оператор, который при действии на вектор состояния оставляет его неизменным. Его собственное значение равно единице, действительно:

$$\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n | \Psi_m \rangle = \sum_n |\Psi_n\rangle \delta_{mn} = 1 \cdot |\Psi_m\rangle,$$

т.е.

$$\hat{I} |\Psi_m\rangle = 1 \cdot |\Psi_m\rangle. \quad (7.32)$$

В случае непрерывного спектра собственных значений собственные функции нормируются не на единицу, а на δ – функцию Дирака:

$$\int \Psi_f^* \Psi_{f_1} d\xi = \delta(f_1 - f), \quad (7.33)$$

где интегрирование ведётся по всей области изменения переменной ξ . Например, в случае собственных функций оператора импульса $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ условие нормировки имеет вид

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_p^* \Psi_{p_1} dx = \delta(p_1 - p),$$

а нормированные волновые функции

$$\Psi_{p_x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}.$$

Соответственно, в трёхмерном случае

$$\Psi_p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}. \quad (7.34)$$

3. Средние значения физических величин

В теории вероятностей среднее значение величины L , принимающей значения $L_1, L_2, L_3 \dots$ с вероятностями $W_1, W_2, W_3 \dots$ вычисляется по формуле

$$\bar{L} = \sum_n L_n W_n. \quad (7.35)$$

В квантовой механике среднее значение динамической переменной, изображаемой оператором \hat{L} , в состоянии Ψ определяется выражением

$$\bar{L} = \int_V \Psi^* \hat{L} \Psi dV. \quad (7.36)$$

При этом волновая функция нормирована к единице. В обозначениях Дирака определение среднего значения имеет вид

$$\bar{L} = \langle \Psi | \hat{L} | \Psi \rangle. \quad (7.37)$$

Рассмотрим два случая.

а) Волновая функция Ψ является собственной функцией оператора \hat{L} . Тогда из (7.36) следует

$$\bar{L} = \int_V \Psi^* \hat{L} \Psi dV = \int_V \Psi^* \ell \Psi dV = \ell \int_V \Psi^* \Psi dV = \ell, \quad (7.36')$$

т.е. $\bar{L} = \ell$, среднее значение физической величины L совпадает с одним из собственных значений.

б) Волновая функция Ψ не является собственной функцией оператора \hat{L} . Тогда разложим её по ортонормированному базису (7.28). Согласно (7.36) будем иметь

$$\begin{aligned}
\bar{L} &= \int_V \Psi^* \hat{L} \Psi dV = \int_V \sum_m c_m^* \Psi_m^* \hat{L} \sum_n c_n \Psi_n dV \\
&= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \langle \Psi_m^* | \hat{L} | \Psi_n \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \ell_n \delta_{mn} = \sum_n |c_n|^2 \ell_n = \\
&= \sum_n W_n \ell_n.
\end{aligned} \tag{7.38}$$

Т.е. в этом случае среднее значение есть сумма произведения собственных значений ℓ_n на их вероятности W_n .

Из (7.36) и (7.37) видно, что в квантовой механике усреднение проводится по конкретному квантовому состоянию. Формула (7.36) принимается в квантовой механике как один из основных постулатов. Его оправданием является то, что он удовлетворяет основным положениям теории вероятностей.

- 1) Среднее значение достоверной величины совпадает с самой этой достоверной величиной, что следует из (7.36').
- 2) Если в одном и том же квантовом состоянии Ψ среднее значение величины L равно \bar{L} , а среднее значение величины M равно \bar{M} , то среднее значение суммы $\overline{L + M} = \bar{L} + \bar{M}$.

4. Условие совместной определенности физических величин. Коммутация операторов

Одним из важнейших вопросов квантовой механики является вопрос о возможности одновременного измерения значений физических величин.

Теорема 3: для того чтобы физические величины могли иметь одновременно определённые значения в одном и том же квантовом состоянии, необходимо, чтобы их операторы коммутировали.

Пусть два оператора \hat{M} и \hat{L} имеют одновременно определённые собственные значения в одном и том же квантовом состоянии Ψ_n (т.е. Ψ_n является собственной функцией данных операторов):

$$\begin{aligned}\hat{L}\Psi_n &= \ell\Psi_n, \\ \hat{M}\Psi_n &= m\Psi_n.\end{aligned}\tag{7.39}$$

Необходимо доказать, что

$$\boxed{\hat{M}\hat{L} = \hat{L}\hat{M}}.\tag{7.40}$$

Доказательство. Подействуем слева на первое равенство из (7.39) оператором \hat{M} , а на второе равенство из (7.39) оператором \hat{L} ,

$$\begin{aligned}\hat{M}|\hat{L}\Psi_n &= \ell\Psi_n, \\ \hat{L}|\hat{M}\Psi_n &= m\Psi_n,\end{aligned}$$

а затем вычтем из первого равенства второе:

$$(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M})\Psi_n = (m\ell - \ell m)\Psi_n = 0 \cdot \Psi_n.\tag{7.41}$$

Равенство (7.41) символически можно записать в виде

$$\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M} = 0,$$

или через коммутатор

$$[\hat{M}, \hat{L}]_- = 0,\tag{7.42}$$

что совпадает с (7.40).

Если общие собственные функции Ψ_n образуют полную систему, то произвольную волновую функцию Ψ можно разложить по этой системе функций согласно (7.28). Действуя на Ψ коммутатором $\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M}$, получим

$$(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M}) \sum_n c_n \Psi_n = (m\ell - \ell m) \sum_n c_n \Psi_n = 0 \cdot \sum_n c_n \Psi_n.$$

Мы видим, что и в этом случае выполняется требование (7.42). Таким образом, два оператора имеют общие наборы собственных функций, если они коммутируют.

Можно доказать и обратную теорему.

Теорема 4: если два оператора \hat{M} и \hat{L} коммутируют, то они имеют общие собственные функции.

Пусть Ψ_n – собственная функция оператора \hat{L} , т.е. $\hat{L}\Psi_n = \ell\Psi_n$. Необходимо доказать, что если $[\hat{L}, \hat{M}]_- = 0$, то $\hat{M}\Psi_n = m\Psi_n$.

Доказательство.

Подействуем коммутатором рассматриваемых операторов на собственную функцию Ψ_n оператора \hat{L} :

$$(\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L})\Psi_n = \hat{L}(\hat{M}\Psi_n) - \hat{M}(\hat{L}\Psi_n) = \hat{L}(\hat{M}\Psi_n) - \ell(\hat{M}\Psi_n) = 0.$$

Т.е. из условия коммутативности операторов следует, что

$$\hat{L}(\hat{M}\Psi_n) = \ell(\hat{M}\Psi_n).$$

Это означает, что функция $\chi = \hat{M}\Psi_n$ есть собственная функция оператора \hat{L} с собственным значением ℓ , т.е. функция χ пропорциональна функции Ψ_n :

$\hat{M}\Psi_n = m\Psi_n$, что и требовалось доказать. Функция Ψ_n оказывается собственной функцией как для оператора \hat{L} , так и для оператора \hat{M} .

Рассмотрим примеры.

1. Пусть $\hat{M} = x$, $\hat{L} = \hat{p}_x$. Составим коммутатор этих операторов и подействуем на волновую функцию:

$$(x\hat{p}_x - \hat{p}_x x)\Psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x \right) \Psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial x}{\partial x} \Psi - x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = i\hbar \Psi. \quad (7.43)$$

Таким образом,

$$(x\hat{p}_x - \hat{p}_x x) = [x, \hat{p}_x]_- = i\hbar. \quad (7.44)$$

Следовательно, оператор координаты x и оператор соответствующей проекции импульса \hat{p}_x представляют собой пример некоммутирующих операторов. Аналогичный результат получается и для двух других пар координат и проекций импульса

$$(y\hat{p}_y - \hat{p}_y y) = i\hbar, \quad (7.45)$$

$$(z\hat{p}_z - \hat{p}_z z) = i\hbar. \quad (7.46)$$

Правила перестановок операторов проекций импульса и координат (7.44) – (7.46) называются перестановочными соотношениями Гейзенберга. Они показывают, что импульс и канонически сопряженная ему координата не могут быть одновременно определены в одном и том же квантовом состоянии. Этот вывод согласуется с соотношением неопределенностей Гейзенберга (4.18).

2. Пусть $\hat{M} = x$, $L = \hat{p}_y$. Проведя вычисления коммутатора двух этих операторов по аналогии с (7.43), можно убедиться, что

$$[x, \hat{p}_y]_- = 0. \quad (7.47)$$

Т.е. два данных оператора являются коммутирующими, следовательно, они могут одновременно иметь определенные собственные значения в одном и том же квантовом состоянии.

В общем случае

$$[q_\alpha, \hat{p}_\beta]_- = 0, \text{ если } \alpha \neq \beta. \quad (7.48)$$

Теперь можно уточнить, что значит задать состояние системы в квантовой механике. Основной постулат квантовой механики утверждает, что задание волновой функции полностью определяет все свойства системы в данном состоянии. Однако саму волновую функцию измерить нельзя, физический смысл имеет квадрат её модуля (как было показано в лекции 4). Задать состояние квантовой системы означает задать определенную совокупность квантово-механических величин.

В классической физике состояние системы в каждый момент времени полностью определялось заданием значений всех обобщенных координат и обобщенных импульсов. При этом число независимых переменных равно удвоенному числу степеней свободы системы. Например, состояние движения одной частицы в каждый момент времени определяется набором шести величин: трех проекций радиуса-вектора и трех компонент импульса. В случае системы, состоящей из N частиц, необходимо задать $6N$ величин.

В квантовых системах, как мы уже видели, не все физические величины могут иметь одновременно определенное значение. Полный набор физических величин не может включать в себя и импульсы, и координаты частиц, например, x и p_x , они одновременно не имеют определенных значений, т.к. операторы этих

величин не коммутируют между собой. Поэтому в квантовой механике полный набор образуют физические величины, операторы которых коммутируют.

Например, для системы с тремя степенями свободы в качестве величин, образующих полный набор, можно выбрать три компоненты импульса p_x, p_y, p_z . В этом состоянии определенное значение будет иметь и энергия системы, зависящая от импульса ($E = p^2/2m$). Другой способ выбора полного набора состоит в задании энергии частицы, квадрата момента импульса и проекции момента импульса на некоторое направление.

5. Неравенство Гейзенберга. Принцип дополнительности

Пусть две физические величины M и L не имеют одновременно определенных значений, т.е. их операторы не коммутируют

$$[\hat{M}, \hat{L}]_- = i\hat{C}, \quad (7.49)$$

где $\hat{M}, \hat{L}, \hat{C}$ – самосопряженные операторы. Установим минимально возможное значение произведения неопределенностей этих физических величин $(\Delta M \cdot \Delta L)_{min}$. В качестве меры неопределенностей выберем средние квадратичные отклонения:

$$\overline{\Delta M^2} = \overline{(M - \bar{M})^2} = \overline{M_1^2}, \quad \overline{\Delta L^2} = \overline{(L - \bar{L})^2} = \overline{L_1^2}. \quad (7.50)$$

Рассмотрим вспомогательный неотрицательный интеграл

$$\mathcal{I}(\alpha) = \int_V |(\alpha \hat{M}_1 + i\hat{L}_1)\Psi|^2 dV \geq 0, \quad (7.51)$$

где α – произвольный вещественный параметр, Ψ – волновая функция, интегрирование проводится по всей области изменения независимых переменных. Раскрывая квадрат модуля и пользуясь самосопряженностью операторов \hat{M}_1 и \hat{L}_1 , получим

$$\int_V \Psi^* (\alpha \hat{M}_1 - i \hat{L}_1) (\alpha \hat{M}_1 + i \hat{L}_1) \Psi dV$$

$$= \int_V \Psi^* \left\{ \alpha^2 \hat{M}_1^2 + i\alpha (\hat{M}_1 \hat{L}_1 - \hat{L}_1 \hat{M}_1) + \hat{L}_1^2 \right\} \Psi dV.$$

Учитывая перестановочное соотношение $(\hat{M}_1 \hat{L}_1 - \hat{L}_1 \hat{M}_1) = i \hat{C}$ и определение среднего значения (7.36), получим

$$\alpha^2 \overline{M_1^2} - \alpha \bar{C} + \overline{L_1^2} \geq 0. \quad (7.52)$$

Так как квадратичный по α трехчлен неотрицателен, то корни уравнения $\mathcal{J}(\alpha) = 0$ являются комплексными. Это возможно при условии

$$(\bar{C})^2 - 4 \overline{M_1^2} \overline{L_1^2} \leq 0,$$

т.е.

$$\sqrt{(\overline{\Delta M})^2} \sqrt{(\overline{\Delta L})^2} \geq \frac{|\bar{C}|}{2},$$

или

$$\boxed{\Delta M \cdot \Delta L \geq \frac{|\bar{C}|}{2}}. \quad (7.53)$$

Это и есть неравенство Гейзенберга, связывающее неопределенности двух физических величин M и L . Оно устанавливает минимально возможное значение произведения этих неопределенностей.

В частном случае, когда $\hat{M} = x$, $\hat{L} = \hat{p}_x$, из (7.53) с учетом (7.44) получается неравенство Гейзенберга для координаты и импульса

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}}. \quad (7.54)$$

Неравенство (7.54) является более строгим по сравнению с соотношением неопределенностей (4.18).

Из (7.54) следует, что если в некотором состоянии импульс имеет определенное значение ($\Delta p_x = 0$), то координата x в этом состоянии совершенно неопределенна ($\Delta x = \infty$) и, наоборот, если точно определена координата, то полностью неопределен импульс.

Операторы квантовой механики, соответствующие канонически сопряженным величинам классической механики (например, x и p_x), не коммутируют между собой. Минимальные неопределенности в значениях этих величин при одновременном измерении связаны с величиной \hbar . Если же операторы физических величин коммутируют, то $\hat{C} = 0$ и соответствующие величины могут быть измерены одновременно с произвольной точностью.

Соотношение неопределенностей (и его более общее выражение в форме неравенства Гейзенберга) в силу его фундаментальности возведено в ранг принципа. Принцип неопределенностей Гейзенберга отражает двойственную корпускулярно-волновую природу микрообъектов и устанавливает пределы применимости классического способа описания явлений. Здесь прослеживается аналогия роли кванта действия (постоянной Планка \hbar) в квантовой теории и скорости света (c) в специальной теории относительности Эйнштейна. Установление конечности скорости света ($c = 300\,000$ км/с) привело к пересмотру понятия одновременности событий и ограничило область применимости механики Ньютона ($v \ll c$). Конечность кванта действия ($\hbar \neq 0$) приводит к пересмотру понятия одновременности измерений и ограничивает область применимости классической теории.

Для иллюстрации соотношения неопределенностей рассмотрим мысленный опыт Гейзенберга с микроскопом (рис. 32).

Осветим частицу, находящуюся вблизи точки O , светом с длиной волны λ . Пучок света направлен вдоль оси X . В объектив микроскопа будет попадать рассеянный свет. Очевидно, что чем меньше длина волны падающего электромагнитного излучения, тем точнее определяется положение частицы. Поэтому Гейзенберг в своем мысленном эксперименте рассматривал гамма-микроскоп.

Но малая длина волны означает большую энергию фотонов, способных сообщить частице большой импульс и, следовательно, нарушающих её локализацию в пространстве импульсов. Наоборот, применение фотонов малой энергии означает использование света с большой длиной волны, что приводит к расширению дифракционных полос и к уменьшению точности локализации частицы в обычном координатном пространстве.

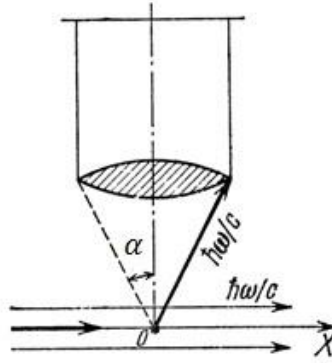


Рис. 32. Определение координаты частицы с помощью микроскопа

Из теории микроскопа известно, что положение частицы может быть определено с точностью до $\Delta x \approx \lambda / \sin \alpha$, где 2α – угол, под которым виден объектив из точки положения. При рассеянии фотона на электроне импульс фотона меняется, проекция изменения импульса на ось X будет лежать в пределах $p \sin \alpha = \pm \frac{h}{\lambda} \sin \alpha = \pm \frac{\hbar \omega}{c} \sin \alpha$. Электрон испытает отдачу, и в результате его импульс получит приращение $\Delta p_x \approx \pm \frac{h}{\lambda} \sin \alpha$. Таким образом, при одновременном измерении координаты и импульса приходим к соотношению

$$\Delta x \Delta p_x \approx \frac{\lambda}{\sin \alpha} \cdot \frac{h}{\lambda} \sin \alpha \approx h.$$

С неравенством Гейзенберга тесно связан принцип дополнительности, сформулированный Н. Бором в 1927 г. Сущность его состоит в следующем. Описание физических свойств микрообъектов на классическом языке требует использования пар дополнительных переменных, причем каждый член пары определяется тем точнее, чем менее точно определен другой. Т.е. динамические переменные распадаются на два взаимоисключающих класса, которые являются дополнительными друг к другу, так что их совокупность дает в классическом понимании полное описание состояния системы. Такими двумя классами могут быть пространственно-временные и импульсно-энергетические переменные. Отсюда следует вывод о существовании двух классов измерительных приборов, совместное применение которых может давать полную классическую картину. По существу это означает необходимость введения понятия относительности

к средствам наблюдения, которое обобщает известное из классической физики понятие относительности к системе отсчета. Это вовсе не означает, что объекту приписывается меньшая степень реальности, чем измерительному прибору, или, что свойства объекта сводятся к свойству прибора. Необходимость применения разных классов приборов обусловлено объективно существующей двойственной природой микрочастиц.



Вернер Гейзенберг
(1901–1976)

Выдающийся немецкий физик-теоретик. Создал матричную квантовую механику (1925 г.).

Сформулировал принцип неопределённости (1927 г.), ограничивающий применение к микрообъектам классических понятий и представлений.

Имеет работы по квантовой механике, квантовой электродинамике, релятивистской квантовой теории поля, теории атомного ядра, физике космических лучей, теории элементарных частиц.

Автор многих работ по философии физики и теории познания.

Награждён Нобелевской премией в 1932 г. «за создание квантовой механики, применение которой привело помимо прочего к открытию аллотропических форм водорода». Член Германской академии наук и многих иностранных академий.

Талантливый пианист.

Поль Дирак:

«У меня есть наиболее веские причины быть почитателем Вернера Гейзенберга. Мы учились в одно время, были почти ровесниками и работали над одной и той же проблемой. Гейзенберг преуспел там, где у меня были неудачи. К тому времени накопилось огромное количество спектроскопического материала, и Гейзенберг нашел правильный путь в его лабиринте. Сделав это, он положил начало золотому веку теоретической физики, и вскоре выполнять первоклассные работы имел возможность даже второразрядный студент».

Вернер Гейзенберг:

«Если мы хотим сравнить результаты современной физики частиц с идеями любого из старых философов, то философия Платона представляется наиболее адекватной: частицы современной физики являются представителями групп симметрии, и в этом отношении они напоминают симметричные фигуры платоновской философии».

«История физики не есть только ряд последовательных экспериментальных открытий и наблюдений, к которым присоединяется их математическое описание, она есть также история понятий. Первой предпосылкой понимания феноменов является введение подходящих понятий, только с помощью правильных понятий можем мы на самом деле знать, что мы наблюдаем».

«Науку делают люди. Об этом естественном обстоятельстве легко забывают; еще одно напоминание о нем может способствовать уменьшению прискорбной пропасти между двумя культурами – гуманитарно-художественной и научно-технической».

6. Квантовые флуктуации физических величин в стационарном состоянии. Измерения в квантовой механике

Рассмотрим квантово-механическую систему с гамильтонианом, не зависящим от времени, но зависящим от некоторого параметра f .

Продифференцируем стационарное уравнение Шрёдингера

$$(\hat{H} - E_n)\Psi_n = 0 \quad (7.55)$$

по f , затем умножим его слева на Ψ_n^* , в результате получим

$$\Psi_n^*(\hat{H} - E_n)\frac{\partial\Psi_n}{\partial f} = \Psi_n^*\left(\frac{\partial E_n}{\partial f} - \frac{\partial\hat{H}}{\partial f}\right)\Psi_n.$$

Проинтегрируем это уравнение по всему объему

$$\int_V \Psi_n^*(\hat{H} - E_n)\frac{\partial\Psi_n}{\partial f} dV = \int_V \Psi_n^*\left(\frac{\partial E_n}{\partial f} - \frac{\partial\hat{H}}{\partial f}\right)\Psi_n dV.$$

Учитывая условие эрмитовости, получаем для левой части

$$\int_V \Psi_n^*(\hat{H} - E_n)\frac{\partial\Psi_n}{\partial f} dV = \int_V \frac{\partial\Psi_n}{\partial f} \{(\hat{H} - E_n)\Psi_n\}^* dV = 0.$$

Таким образом, получаем следующий результат:

$$\overline{\left(\frac{\partial\hat{H}}{\partial f}\right)}_n = \frac{\partial E_n}{\partial f},$$

или

$$\boxed{\left(\frac{\partial H}{\partial f}\right)_{nn} = \frac{\partial E_n}{\partial f}}. \quad (7.56)$$

Эта формула называется теоремой Гельмана-Фейнмана, согласно которой изменение энергии n -го стационарного состояния в зависимости от параметра f определяется средним значением изменения гамильтониана по этому параметру в данном стационарном состоянии.

Мы видели, что соотношение неопределенностей Гейзенберга связывает между собой неопределенности двух физических величин. Покажем, используя

только что доказанную теорему, что можно установить выражение для неопределенности (или флуктуации) одной физической величины в стационарном состоянии.

Во многих случаях гамильтониан может быть представлен в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - fx, \quad (7.57)$$

где x – оператор обобщенной координаты, не зависящий от обобщенной силы f , \hat{H}_0 – часть гамильтониана, также не зависящая от f . Такую структуру имеет, например, гамильтониан, описывающий энергию магнитного момента μ во внешнем магнитном поле \mathcal{H} : $U = -(\hat{\mu} \vec{\mathcal{H}})$, когда $x = \mu$, а роль обобщенной силы играет напряженность магнитного поля \mathcal{H} .

Из (7.56) следует

$$x_{nn} = \langle n|x|n \rangle = -\frac{\partial E_n}{\partial f}. \quad (7.58)$$

Умножим (7.55) слева на x , затем продифференцируем по f , тогда получим

$$x \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial f} - \frac{\partial E_n}{\partial f} \right) \Psi_n = x(E_n - \hat{H}) \frac{\partial \Psi_n}{\partial f}. \quad (7.59)$$

Умножим (7.59) слева на Ψ_n^* и проинтегрируем

$$\left\langle \Psi_n \left| x \frac{\partial \hat{H}}{\partial f} \right| \Psi_n \right\rangle - \frac{\partial E_n}{\partial f} \langle \Psi_n | x | \Psi_n \rangle = E_n \left\langle \Psi_n \left| x \frac{\partial \Psi_n}{\partial f} \right\rangle - \left\langle \Psi_n \left| x \hat{H} \frac{\partial \Psi_n}{\partial f} \right\rangle.\right.$$

Согласно (7.57)

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial f} = -x.$$

Поэтому с учетом (7.58) получаем

$$(\Delta x)_n^2 = \left\langle \Psi_n \left| \hat{H} x \frac{\partial \Psi_n}{\partial f} \right\rangle + \left\langle \Psi_n \left| [x, \hat{H}]_- \frac{\partial \Psi_n}{\partial f} \right\rangle - E_n \left\langle \Psi_n \left| x \frac{\partial \Psi_n}{\partial f} \right\rangle. \quad (7.60)$$

Здесь учтено, что $x\hat{H} = \hat{H}x + [x, \hat{H}]_-$, а средняя квадратичная флуктуация $(\Delta x)_n^2$ в состоянии Ψ_n определяется выражением

$$(\Delta x)_n^2 = \langle n|x^2|n \rangle - \langle n|x|n \rangle^2.$$

Так как гамильтониан является эрмитовым оператором, то первый и третий интегралы в (7.60) взаимно сокращаются. Таким образом, получаем следующее выражение для среднеквадратичной флуктуации физической величины x в стационарном состоянии Ψ_n в присутствии обобщенной силы f [9]

$$\boxed{(\Delta x)_n^2 = \left\langle \Psi_n \left| [x, \hat{H}]_- \left| \frac{\partial \Psi_n}{\partial f} \right. \right\rangle}. \quad (7.61)$$

Поскольку x коммутирует с f , то $[x, \hat{H}]_- = [x, \hat{H}_0]_-$. Тогда приходим к следующему результату

$$(\Delta x)_n^2 = \left\langle \Psi_n \left| [x, \hat{H}_0]_- \left| \frac{\partial \Psi_n}{\partial f} \right. \right\rangle. \quad (7.62)$$

Из (7.62) следует, что в случае, когда x коммутирует с \hat{H}_0 , среднеквадратичная флуктуация $(\Delta x)_n^2$ равна нулю. Это согласуется с тем, что в этом случае x и E_n могут иметь определенные значения в одном и том же стационарном состоянии.

Формулы (7.61) и (7.62) позволяют установить связь между неопределенностью физической величины и жесткостью волновой функции $\frac{\partial \Psi_n}{\partial f}$. Если $[x, \hat{H}]_- \neq 0$, но волновая функция является жесткой по отношению к обобщенной силе, т.е. $\frac{\partial \Psi_n}{\partial f} = 0$, тогда флуктуации $(\Delta x)_n^2$ отсутствуют.

Квантовые флуктуации в стационарном состоянии (7.61), так же как и неравенство Гейзенберга, отражают объективное свойство самой квантовой системы, вытекающее из её природы. Неопределенности координаты и импульса в (7.54) или квантовые флуктуации в (7.61) не имеют ничего общего с погрешностями измерений, возникающих в результате несовершенства физических приборов. В этом состоит одно из важных отличий квантового описания от классического.

Что составляло основу классического описания?

1) Полная независимость физических процессов от условий наблюдения: всегда можно «подсмотреть» явление, не влияя на него, и получить информацию об исследуемой системе, не возмущая её.

2) Возможность неограниченного уточнения наблюдения. Имеется в виду не только всё более точное измерение данной величины, но и одновременное измерение кроме этой величины ещё и любой другой величины, относящейся к изучаемому объекту или явлению. Т.е. допускается возможность одновременного описания разных сторон и разных характеристик объекта в данном физическом процессе.

Процесс измерения в квантовой механике, в отличие от классической механики, оказывает воздействие на измеряемую систему, и это воздействие не может быть сделано сколь угодно малым.

Фундаментальным ограничением квантовой механики является невозможность одновременно увидеть микрообъект во всей полноте. Кроме того, наблюдение предполагает наличие определенных физических условий, которые могут оказаться связанными с сущностью явления. Согласно соотношению (7.54) локализация частицы в какой-либо малой области пространства требует физических условий, неблагоприятных для измерения ее импульса (т.е. для локализации ее в импульсном пространстве). А условия, необходимые для точного измерения импульса, исключают возможность локализации частицы в малой области обычного координатного пространства.

Необходимость различать измеряемое значение величины и значение, создаваемое в процессе измерения, отражает «двуликую» природу процесса измерения в квантовой механике. Это можно пояснить, анализируя мысленный эксперимент по столкновению электрона с некоторой другой («измерительной») частицей, роль которой играет идеально отражающее плоское зеркало. Полагая, что значения энергии и импульса до и после взаимодействия для «измерительной» частицы известны точно, т.е. неопределенности этих величин отсутствуют, можно записать следующие выражения для неопределенности импульса и энергии электрона

$$\Delta p = \Delta p', \quad |\Delta E - \Delta E'| \sim \frac{h}{\Delta t}. \quad (7.63)$$

Штрихами обозначены величины после столкновения; второе выражение учитывает соотношение неопределенностей для энергии и времени.

Но $\Delta E = \frac{\partial E}{\partial p} \Delta p = v \Delta p$, где v – скорость электрона до столкновения. Аналогично $\Delta E' = v' \Delta p' = v' \Delta p$. Поэтому с учетом (7.63) получаем

$$|(v'_x - v_x) \Delta p_x| \sim \frac{\hbar}{\Delta t}. \quad (7.64)$$

Из (7.64) следует, что измерение импульса электрона связано с изменением его скорости, а значит и самого импульса. Это изменение тем больше, чем короче длительность процесса измерения.

Процесс измерения (или наблюдения) может не только изменять состояние микрообъекта, но и оказывать влияние на протекание физического явления. Пример такого влияния демонстрирует квантовый эффект Зенона (Часть II. Приложение V).

В «Лекциях по основам квантовой механики» [21] Л.И. Мандельштам проводит разграничение между прямыми и косвенными измерениями, проводимыми над квантовой системой. К прямым относятся измерения, при которых искомое значение физической величины определяется непосредственно путём сравнения с мерой этой величины. Например, падающий на фотопластинку электрон вызывает ее почернение. Макроскопическая координата почерневшего пятнышка совпадает с координатой электрона в момент его удара о фотопластинку. Прямые измерения возможны только над свободными или почти свободными частицами в слабых полях. Косвенные измерения состоят в том, что исследуемую квантовую систему мы заставляем взаимодействовать с другой микросистемой, над которой возможны прямые измерения. Данные этих прямых измерений далее используются для теоретического вычисления значений величин, относящихся ко второй системе. В случае несвободных частиц косвенное измерение является единственно возможным. Примерами косвенных измерений являются рассмотренный мысленный эксперимент Гейзенберга или определение координаты электрона в атоме по рассеянию пучка свободных частиц.

Лекция 8. Изменение во времени механических величин

1. Дифференцирование операторов по времени. Квантовые скобки Пуассона

Вычислим производную по времени от среднего значения механической величины L . По определению среднего значения (7.36)

$$\bar{L} = \int_V \Psi^* \hat{L} \Psi dV.$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{L}}{dt} &= \frac{d}{dt} \int_V \Psi^* \hat{L} \Psi dV = \int_V \frac{d}{dt} (\Psi^* \hat{L} \Psi) dV = \\ &= \int_V \left(\Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{L} \Psi + \Psi^* \hat{L} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dV. \end{aligned} \quad (8.1)$$

Используя уравнение Шрёдингера (6.15), находим производные

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi, \\ \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \Psi)^* = \frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \Psi^* = \frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi^*. \end{aligned}$$

Это позволяет переписать (8.1) в виде

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \int_V \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi dV + \frac{i}{\hbar} \int_V (\hat{H} \Psi^*) \hat{L} \Psi dV - \frac{i}{\hbar} \int_V \Psi^* \hat{L} \hat{H} \Psi dV. \quad (8.2)$$

Учитывая эрмитовость оператора Гамильтона \hat{H} , преобразуем второй интеграл в правой части (8.2) к виду

$$\int_V (\hat{H} \Psi^*) \hat{L} \Psi dV = \int_V \Psi^* \hat{H} \hat{L} \Psi dV.$$

Тогда получаем из (8.2)

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \int_V \Psi^* \left\{ \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H}) \right\} \Psi dV = \int_V \Psi^* \left\{ \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}]_- \right\} \Psi dV. \quad (8.3)$$

Из (8.3) видно, что производная от среднего значения физической величины может быть представлена как среднее значение от некоторого оператора

$$\frac{d}{dt}(\bar{L}) = \overline{\frac{d\hat{L}}{dt}} = \int_V \Psi^* \frac{d\hat{L}}{dt} \Psi dV, \quad (8.4)$$

$$\boxed{\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \{\hat{H}, \hat{L}\}}, \quad (8.5)$$

где оператор

$$\boxed{\{\hat{H}, \hat{L}\} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}]_- = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H})} \quad (8.6)$$

называется квантовыми скобками Пуассона, по аналогии с классической механикой.

Соответственно (8.3) можно переписать в следующей форме

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{\partial \bar{L}}{\partial t} + \overline{\{\hat{H}, \hat{L}\}}. \quad (8.7)$$

Операторное равенство (8.5) представляет собой правило дифференцирования оператора по времени: для вычисления полной производной по времени оператора некоторой механической величины необходимо найти частную производную и добавить квантовые скобки Пуассона.

Аналогия с классической механикой возникает следующим образом. В классической механике полная производная по времени от механической величины $L(q, p, t)$ определяется формулой

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial L}{\partial q_{\alpha}} \dot{q}_{\alpha} + \frac{\partial L}{\partial p_{\alpha}} \dot{p}_{\alpha} \right), \quad (8.8)$$

где производные \dot{q}_{α} и \dot{p}_{α} удовлетворяют каноническим уравнениям Гамильтона

$$\dot{q}_{\alpha} = \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}}, \quad \dot{p}_{\alpha} = -\frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}}. \quad (8.9)$$

При этом полная производная

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial t} + (H, L) \quad (8.10)$$

выражается через классические скобки Пуассона

$$(H, L) = \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial L}{\partial q_{\alpha}} - \frac{\partial L}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} \right). \quad (8.11)$$

Для обобщенной координаты $q_{\alpha} = x_{\alpha}$ и канонически сопряженного с ней импульса p_{α} формула (8.11) принимает вид

$$(H, L) = \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial L}{\partial x_{\alpha}} - \frac{\partial L}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial H}{\partial x_{\alpha}} \right). \quad (8.12)$$

Аналогия между (8.5) и (8.10) позволила назвать оператор (8.6) квантовыми скобками Пуассона.

Если оператор \hat{L} или механическая величина L явно от времени не зависят, то (8.5) и (8.10) принимают вид

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \{\hat{H}, \hat{L}\}, \quad (8.13)$$

$$\frac{dL}{dt} = (H, L). \quad (8.14)$$

Аналогия между квантовыми и классическими формулами становится еще более ясной при рассмотрении уравнений движения. Полагая в классическом уравнении (8.14) $L = x$, находим

$$\frac{dx}{dt} = (H, x) = \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial x}{\partial x} - \frac{\partial x}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial H}{\partial p}. \quad (8.15)$$

Аналогично, выбирая в качестве L величину p , получим

$$\frac{dp}{dt} = (H, p) = \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial p}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial H}{\partial x}. \quad (8.16)$$

Таким образом, уравнение (8.14), определяющее изменение некоторой механической величины, содержит в себе уравнения движения в форме Гамильтона (8.9).

Квантовое уравнение (8.13) для оператора \hat{L} определяет закон изменения соответствующей механической величины. Выбрав в качестве динамических переменных операторы координаты и импульса частицы, получим следующие операторные уравнения

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \{\hat{H}, \hat{x}\}, \quad \frac{d\hat{y}}{dt} = \{\hat{H}, \hat{y}\}, \quad \frac{d\hat{z}}{dt} = \{\hat{H}, \hat{z}\}, \quad (8.17)$$

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = \{\hat{H}, \hat{p}_x\}, \quad \frac{d\hat{p}_y}{dt} = \{\hat{H}, \hat{p}_y\}, \quad \frac{d\hat{p}_z}{dt} = \{\hat{H}, \hat{p}_z\}. \quad (8.18)$$

Эти уравнения аналогичны классическим уравнениям Гамильтона, поэтому они называются квантовыми уравнениями Гамильтона.

2. Законы сохранения в квантовой механике и их связь со свойствами симметрии пространства и времени

Из (8.5) и (8.6) следует, что если оператор \hat{L} явно не зависит от времени и коммутирует с гамильтонианом \hat{H} , то среднее значение физической величины L не изменяется с течением времени. Такая величина называется интегралом квантовых уравнений движения. Т.е. $\bar{L} = const$, если выполняются два условия:

$$\begin{cases} 1) \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = 0, \\ 2) \hat{L}\hat{H} = \hat{H}\hat{L}. \end{cases} \quad (8.19)$$

При этом

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \{\hat{H}, \hat{L}\} \equiv 0. \quad (8.20)$$

Применим равенство (8.20) к гамильтониану. Полагая $\hat{L} = \hat{H}$, получаем

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} + \{\hat{H}, \hat{H}\} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t}. \quad (8.21)$$

Если гамильтониан не зависит явно от времени, то

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0. \quad (8.22)$$

Это условие выполняется, если потенциальная энергия не зависит явно от времени: $\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = 0$. При этом $\bar{E} = const$. В отличие от классической механики в квантовой механике энергия сохраняется в среднем. Не есть ли это ограничение справедливости закона сохранения энергии? Ответ заключается в следующем. В стационарных состояниях, описываемых уравнением Шрёдингера

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

энергия сохраняется точно ($\bar{H} = \bar{E} = E = const$). Если состояние не является стационарным, то согласно (7.38)

$$\bar{E} = \sum_n E_n W_n = const, \quad (8.23)$$

т.е. сохраняется среднее значение энергии. Сохранение энергии в среднем означает расширение сферы действия закона сохранения энергии на случай квантовых переходов, которые могут возникать при взаимодействии системы с внешними факторами.

В классической механике скобки Пуассона (8.11) используются для установления законов сохранения или первых интегралов уравнений движения. Таким способом получают семь законов сохранения (для проекций импульса p_x, p_y, p_z ;

для проекций момента импульса K_x, K_y, K_z и закон сохранения энергии). В 1918 г. Э. Нётер доказала теорему, устанавливающую связь между преобразованиями, оставляющими лагранжиан инвариантным (неизменным), и законами сохранения в классической механике. Тем самым была установлена связь законов сохранения со свойствами симметрии пространства и времени. Аналогичная связь существует и в квантовой механике. Покажем, что законы сохранения связаны с инвариантностью гамильтониана относительно тех или иных преобразований.

Пусть выполняются условия (8.19), приводящие к сохранению среднего значения некоторой физической величины L . Действуя слева оператором \hat{L} на стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{L}\hat{H}\Psi = E\Psi,$$

получим с учетом коммутации этого оператора с гамильтонианом

$$\hat{H}\hat{L}\Psi = E\hat{L}\Psi.$$

При этом форма уравнения Шрёдингера не изменилась. Полагая $\hat{L}\Psi = \Psi_1$, мы снова получаем стационарное уравнение

$$\hat{H}\Psi_1 = E\Psi_1.$$

Т.е. имеет место инвариантность гамильтониана по отношению к преобразованию, осуществляемому оператором \hat{L} . Поэтому каждой операции симметрии \hat{L} должен соответствовать определенный закон сохранения в квантовой механике.

Основными свойствами пространства и времени являются: однородность и изотропность пространства, однородность времени. Установим их связь с законами сохранения в квантовой механике.

а) *Однородность пространства.*

Однородность пространства состоит в том, что свойства замкнутой системы не меняются при любом параллельном переносе системы как целого. Это свойство должно проявляться в том, что гамильтониан остается инвариантным при трансляции системы на произвольное расстояние. Любое конечное смещение можно составить из бесконечно малых смещений, поэтому рассмотрим инвариантность оператора Гамильтона относительно бесконечно малого смещения dx .

Волновая функция $\Psi(x)$ при бесконечно малом смещении dx перейдет в функцию $\Psi(x + dx)$. Разложим ее в ряд Тейлора, ограничившись линейным членом

$$\hat{L}\Psi(x) = \Psi(x + dx) = \Psi(x) + \frac{\partial\Psi}{\partial x} dx = \left(1 + \frac{\partial}{\partial x} dx\right) \Psi(x). \quad (8.24)$$

Умножим и разделим второе слагаемое в скобке на $-i\hbar$, тогда из (8.24) получим, что оператор бесконечно малого смещения \hat{L} содержит в себе оператор проекции импульса \hat{p}_x

$$\hat{L} = 1 + \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x dx. \quad (8.25)$$

Поэтому условие инвариантности гамильтониана относительно бесконечно малого смещения сводится к равенству

$$\hat{p}_x \hat{H} = \hat{H} \hat{p}_x, \quad (8.26)$$

которое согласно (8.19) означает, что импульс свободной частицы является интегралом движения

$$\bar{p}_x = const. \quad (8.27)$$

Аналогичный вывод имеет место и для двух других проекций импульса.

Таким образом, закон сохранения импульса есть следствие однородности пространства.

б) Изотропность пространства.

Изотропность пространства (эквивалентность всех направлений) означает инвариантность свойств замкнутой системы относительно произвольных поворотов.

Известно, что в результате поворота системы координат в плоскости XY на угол φ (рис. 33) преобразование координат происходит следующим образом:

$$\begin{cases} x' = x \cdot \cos \varphi + y \cdot \sin \varphi, \\ y' = -x \cdot \sin \varphi + y \cdot \cos \varphi. \end{cases} \quad (8.28)$$

При повороте на бесконечно малый угол $d\varphi$ преобразования (8.28) принимают вид

$$\begin{cases} x' = x + y \cdot d\varphi = x + dx, \\ y' = -x \cdot d\varphi + y = y + dy. \end{cases} \quad (8.29)$$

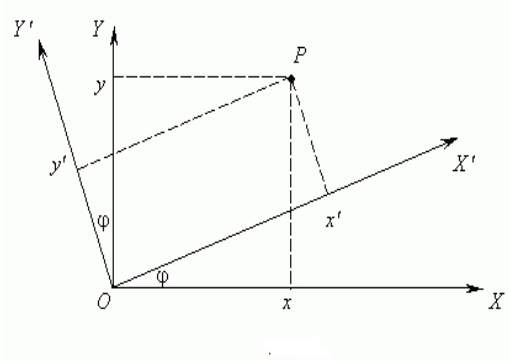


Рис. 33. Поворот системы координат XOY в плоскости на угол φ

По аналогии с (8.24) изменение волновой функции при учете членов первого порядка малости определяется выражением

$$\hat{L}\Psi(x, y) = \Psi(x, y) + \frac{\partial\Psi}{\partial x} y d\varphi + \frac{\partial\Psi}{\partial y} (-x d\varphi) = \left\{ 1 - d\varphi \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} \Psi(x, y).$$

Отсюда следует, что оператор бесконечно малого поворота на угол $d\varphi$ может быть выражен через оператор момента импульса \hat{K}_z :

$$\hat{L} = 1 - \frac{i}{\hbar} d\varphi \hat{K}_z. \quad (8.30)$$

Поэтому условие инвариантности гамильтониана относительно произвольных бесконечно малых поворотов сводится к равенству

$$\hat{K}_z \hat{H} = \hat{H} \hat{K}_z, \quad (8.31)$$

которое согласно (8.19) означает, что момент импульса является интегралом движения

$$\bar{K}_z = const. \quad (8.32)$$

Таким образом, изотропность пространства приводит к закону сохранения момента импульса.

в) *Однородность времени.*

Однородность времени означает инвариантность физических законов относительно выбора начала отсчета времени. Введем оператор \hat{L} смещения во времени, под действием которого волновая функция преобразуется следующим образом

$$\hat{L}\Psi(t) = \Psi(t + dt) = \Psi(t) + \frac{\partial\Psi}{\partial t} dt = \left(1 + \frac{\partial}{\partial t} dt\right)\Psi(t). \quad (8.33)$$

Оператор \hat{L} можно выразить через гамильтониан:

$$\hat{L} = 1 - \frac{i}{\hbar} dt \hat{H}. \quad (8.34)$$

Согласно (8.19) условие инвариантности гамильтониана относительно бесконечно малого смещения во времени сводится к равенству

$$\hat{L}\hat{H} = \hat{H}\hat{L}, \text{ т.е. } \hat{H}\hat{H} = \hat{H}\hat{H}, \quad (8.35)$$

которое означает, что энергия является интегралом движения

$$\bar{H} = \bar{E} = \text{const}. \quad (8.36)$$

Таким образом, однородность времени приводит к закону сохранения энергии в квантовой механике.

3. Закон сохранения четности в квантовой механике

Законы сохранения импульса, момента импульса и энергии являются квантово-механическими аналогами законов сохранения классической механики. Однако в квантовой механике имеют место и законы сохранения, не имеющие классического аналога. Один из них – закон сохранения четности.

Рассмотренные преобразования трансляций и поворотов относятся к классу непрерывных преобразований, они могут осуществляться путем многократного повторения бесконечно малых преобразований. Наряду с непрерывными преобразованиями условия симметрии могут приводить к дискретным преобразованиям. Одним из дискретных преобразований, относительно которого гамильтониан остается инвариантным, является преобразование пространственной инверсии (пространственного отражения). Оно сводится к изменению знака всех трех пространственных координат частицы

$$x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z. \quad (8.37)$$

При этом правая система координат переходит в левую систему координат.

Введем оператор инверсии $\hat{\mathcal{P}}$. По определению этого оператора его действие на волновую функцию сводится к преобразованию

$$\hat{\mathcal{P}}\Psi(\vec{r}) = \Psi(-\vec{r}). \quad (8.38)$$

Для отыскания собственных значений оператора инверсии необходимо решить уравнение

$$\hat{\mathcal{P}}\Psi(\vec{r}) = \lambda_{\mathcal{P}}\Psi(\vec{r}). \quad (8.39)$$

Применив к обеим частям уравнения (8.39) оператор инверсии, получим

$$\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{P}}\Psi(\vec{r}) = \lambda_{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{P}}\Psi(\vec{r}) = \lambda_{\mathcal{P}}^2\Psi(\vec{r}).$$

Двукратное применение оператора $\hat{\mathcal{P}}$ сводится к тождественному преобразованию, поэтому

$$\Psi(\vec{r}) = \lambda_{\mathcal{P}}^2\Psi(\vec{r}). \quad (8.40)$$

Из (8.40) следует, что квадрат собственного значения оператора инверсии

$$\lambda_{\mathcal{P}}^2 = 1,$$

поэтому $\lambda_{\mathcal{P}} = \pm 1$. Собственное значение $\lambda_{\mathcal{P}}$ оператора инверсии называется четностью. Мы видим, что состояния с определенным собственным значением оператора $\hat{\mathcal{P}}$ распадаются на два класса:

1) четные состояния, волновые функции которых остаются без изменения при действии оператора инверсии

$$\hat{\mathcal{P}}\Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}), \lambda_{\mathcal{P}} = 1; \quad (8.41)$$

2) нечетные состояния, волновые функции которых меняют знак при действии оператора инверсии

$$\hat{\mathcal{P}}\Psi(\vec{r}) = -\Psi(\vec{r}), \lambda_{\mathcal{P}} = -1. \quad (8.42)$$

Условием сохранения четности (наличия право-левой симметрии) является коммутация оператора инверсии с гамильтонианом

$$[\hat{\mathcal{P}}, \hat{H}]_- = 0. \quad (8.43)$$

Таким образом, инвариантность гамильтониана по отношению к преобразованию пространственной инверсии приводит к закону сохранения четности. Это означает, что процессы в нашем мире и в мире, который получается при зеркальном отражении, должны протекать одинаково.

Закон сохранения четности требует, чтобы эта величина оставалась неизменной во времени. Например, при переходе атома из одного состояния в другое, сопровождающемся излучением фотона, четность начального состояния должна быть равна четности конечного состояния с учетом четности испущенного фотона. Невозможность переходов замкнутой квантовой системы из состояния с одной четностью в состояние с другой четностью приводит к правилам отбора, имеющим место как в атомной, так и в ядерной физике.

Рассмотренная четность, связанная с изменением знака \vec{r} , называется орбитальной четностью. В общем случае четность определяется произведением орбитальной λ_p и внутренней λ_0 четности:

$$\lambda = \lambda_p \cdot \lambda_0 . \quad (8.44)$$

Формально внутреннюю четность можно ввести следующим образом:

$$\hat{P}\Psi(0) = \lambda_0 \Psi(0), \quad (8.45)$$

$\hat{P}\Psi(0) = \Psi(0)$, $\lambda_0 = 1$, положительная внутренняя четность;

$\hat{P}\Psi(0) = -\Psi(0)$, $\lambda_0 = -1$, отрицательная внутренняя четность.

Внутренняя четность определяется не состоянием, а природой частицы, это такая же ее характеристика, как масса, заряд, спин и т.п. Введение внутренней четности имеет очень важное значение для микромира, где возможны процессы рождения и исчезновения частиц.

Закон сохранения четности выполняется в электромагнитных и ядерных взаимодействиях. В 1956 г. Ли, Янг и Ву установили, что в слабых взаимодействиях четность не сохраняется, т.е. имеет место нарушение зеркальной симметрии пространства. К числу таких процессов относятся β -распад атомных ядер, распад μ^- , π^- , K-мезонов и гиперонов.

Фундаментальная теорема квантовой теории поля – $\hat{C}\hat{P}\hat{T}$ – теорема (Людерс, 1951 г. и Паули, 1955 г.) утверждает, что в любых взаимодействиях инвариантом является произведение трех операций симметрии: зарядового сопряжения \hat{C} (которое превращает частицу в ее античастицу), пространственной инверсии \hat{P} и обращения времени \hat{T} . Подробно этот вопрос рассматривается в курсе физики атомного ядра и элементарных частиц.

Лекция 9. Связь квантовой механики с классической механикой

1. Обобщение уравнения Гамильтона–Якоби в квантовой механике

В классической механике известно уравнение Гамильтона–Якоби

$$-\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{(\nabla S_0)^2}{2m} + U(\vec{r}). \quad (9.1)$$

Это дифференциальное уравнение в частных производных первого порядка от действительной функции действия, которая определяется через функцию Лагранжа L с помощью интеграла

$$S_0(\vec{r}, t) = \int_0^t L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t') dt'. \quad (9.2)$$

При этом импульс частицы определяется соотношением

$$\vec{p} = \text{grad } S_0, \quad (9.3)$$

откуда следует, что траектория частицы в классической механике нормальна к поверхностям равных значений функции действия.

В стационарном случае функция действия имеет вид

$$S_0(\vec{r}, t) = S_0(\vec{r}) - Et, \quad (9.4)$$

где независящая от времени часть $S_0(\vec{r})$ представляет собой «укороченное» действие, E – полная механическая энергия частицы. Согласно (9.4)

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = -E. \quad (9.5)$$

Из (9.1) с учетом (9.5) вытекает стационарное уравнение Гамильтона–Якоби

$$\frac{(\nabla S_0)^2}{2m} + U(\vec{r}) = E. \quad (9.6)$$

В случае свободного движения частицы ($U = 0, \vec{p} = \text{const}, E = \text{const}$) функция действия определяется выражением

$$S_0(\vec{r}, t) = \vec{p}\vec{r} - Et. \quad (9.10)$$

В классической механике входящие в эту формулу координата и импульс частицы могут быть определены точно в каждый момент времени.

Основным уравнением нерелятивистской квантовой механики является уравнение Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi. \quad (9.11)$$

Установим его связь с классическим уравнением Гамильтона–Якоби. Для этого запишем волновую функцию в следующем виде

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{r}, t)}, \quad (9.12)$$

где $S(\vec{r}, t)$ – функция, имеющая размерность действия (квантовый аналог классической функции действия).

Вычислим производные:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \Psi, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x} \Psi, \quad (9.13)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Psi - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 \Psi, \quad \nabla^2 \Psi = \frac{i}{\hbar} \nabla^2 S \Psi - \frac{1}{\hbar^2} (\nabla S)^2 \Psi. \quad (9.14)$$

Подстановка (9.13) и (9.14) в уравнение Шрёдингера (9.11) после сокращения на Ψ приводит к уравнению

$$\boxed{-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\nabla S)^2}{2m} + U - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S}, \quad (9.15)$$

определяющему комплексную функцию $S(\vec{r}, t)$. Сравнение (9.15) с классическим уравнением Гамильтона–Якоби (9.1) для действительной функции действия S_0 показывает, что уравнение (9.15), содержащее постоянную Планка, является квантовым обобщением уравнения Гамильтона–Якоби (КОУГЯ). Уравнение (9.15) полностью эквивалентно уравнению Шрёдингера (9.11).

В стационарном случае, когда $S(\vec{r}, t) = S(\vec{r}) - Et$, из (9.15) получается стационарное КОУГЯ

$$\boxed{\frac{(\nabla S)^2}{2m} + U - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S = E}. \quad (9.16)$$

Также как и уравнение (9.15), оно содержит дополнительный к классическому уравнению член $U_{\text{кв}} = -\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S$, пропорциональный \hbar , являющийся частью оператора кинетической энергии

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{(\nabla S)^2}{2m} - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S. \quad (9.17)$$

Таким образом, стационарное и полное уравнения Гамильтона–Якоби соответствуют стационарному и полному уравнениям Шрёдингера.

Поскольку КОУГЯ совершенно эквивалентно уравнению Шрёдингера, то его можно положить в основу волновой (квантовой) теории. Основным «препятствием» для использования этого уравнения является его нелинейность. Разработка приближенного метода решения уравнения (9.16), основанного на введении поправок в классическое описание, пропорциональных \hbar , принадлежит Вентцелю, Крамерсу и Бриллюэну. Этот метод получил название квазиклассического приближения (или приближения ВКБ) [11, 17, 29].

Однако КОУГЯ можно применить и для точно решаемых квантовых задач путем понижения порядка этого дифференциального уравнения. В случае одномерного движения, когда $U = U(x)$, $\Psi = \Psi(x)$, $S = S(x)$, КОУГЯ (9.16) имеет вид

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{dS}{dx}\right)^2 + U - \frac{i\hbar}{2m}\frac{d^2S}{dx^2} = E. \quad (9.18)$$

Это уравнение, как и уравнение Шрёдингера, содержит производную второго порядка. Порядок его можно понизить, полагая

$$f = \frac{dS}{dx}. \quad (9.19)$$

После подстановки (9.19) в уравнение (9.18) получаем нелинейное дифференциальное уравнение первого порядка

$$-\frac{i\hbar}{2m}\frac{df}{dx} + \frac{1}{2m}f^2 + U = E. \quad (9.20)$$

Преимущество использования КОУГЯ, состоящее в возможности понижения его порядка, будет проиллюстрировано в дальнейшем при обсуждении точно решаемых задач (хотя этот вопрос относится к числу дискуссионных).

2. Предельный переход к классической механике

При $\hbar \rightarrow 0$ КОУГЯ (9.15) принимает вид

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\nabla S)^2}{2m} + U, \quad (9.21)$$

или в одномерном случае

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 + U. \quad (9.22)$$

Уравнение (9.21) или, в частном случае, уравнение (9.22) по форме совпадает с классическим уравнением Гамильтона–Якоби. Таким образом, при $\hbar \rightarrow 0$ имеет место формальный предельный переход от КОУГЯ к классическому уравнению Гамильтона–Якоби. Аналогичный переход осуществляется от стационарного КОУГЯ (9.16) к классическому уравнению (9.6).

Обсудим подробнее возможность перехода от КОУГЯ к классическому уравнению Гамильтона–Якоби. Разложим функцию S по степеням \hbar/i

$$S = S_0 + \left(\frac{\hbar}{i}\right) S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots \quad (9.23)$$

Подставляя (9.23) в уравнение (9.15) и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях \hbar , получаем с точностью до членов, пропорциональных первой степени величины \hbar , два уравнения:

$$-\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{(\nabla S_0)^2}{2m} + U, \quad (9.24)$$

$$-\frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{1}{m} \nabla S_0 \nabla S_1 + \frac{1}{2m} \nabla^2 S_0. \quad (9.25)$$

Уравнение (9.24) совпадает с уравнением (9.1) Гамильтона–Якоби классической механики. Т.е. в нулевом приближении движение частицы происходит по классической траектории. Уравнение (9.25) совпадает с уравнением непрерывности (5.23). Действительно, плотность вероятности нахождения частицы в данном месте пространства есть

$$w = |\Psi|^2 = e^{2S_1}. \quad (9.26)$$

Умножая (9.25) на ψ и учитывая, что

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = 2 \frac{\partial S_1}{\partial t} \psi; \quad \nabla \psi = 2 \nabla S_1 \psi,$$

получаем:

$$-\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{m} (\nabla S_0 \nabla \psi + \psi \nabla^2 S_0) = \operatorname{div} \left(\frac{1}{m} \psi \nabla S_0 \right). \quad (9.27)$$

Это уравнение, эквивалентное уравнению (9.25), представляет собой уравнение непрерывности. Оно показывает, что плотность вероятности перемещается в пространстве с такой же скоростью $v = \nabla S_0 / m$ и по той же траектории, по которой перемещается частица в классической механике.

При переходе от КОУГЯ (9.15) к классическому уравнению (9.24) мы отбросили член $\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S$. Это возможно при выполнении условия

$$\frac{1}{2m} (\nabla S_0)^2 \gg \left| \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S_0 \right|. \quad (9.28)$$

Неравенство (9.28) можно рассматривать как условие перехода квантовой механики в классическую механику.

Учитывая (9.3), можно переписать неравенство (9.28) в виде

$$p^2 \gg \hbar |\operatorname{div} \vec{p}|. \quad (9.29)$$

В одномерном случае неравенство (9.29) преобразуется к виду

$$\hbar \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll p^2. \quad (9.30)$$

Вводя длину волны де Бройля

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p},$$

получаем

$$\frac{d\lambda}{dx} \ll 2\pi, \quad (9.31)$$

или

$$\frac{\lambda}{2\pi} \frac{d\lambda}{dx} \ll \lambda. \quad (9.32)$$

т.е. необходимо, чтобы длина волны де Бройля достаточно медленно менялась в пространстве от точки к точке, ее изменение на расстоянии $\lambda/2\pi$ должно быть значительно меньше самой длины волны.

Если характерные размеры системы обозначить через a , то $\frac{d\lambda}{dx} \sim \frac{\lambda}{a}$, при этом из неравенства (9.31) получается следующее условие перехода к классической механике

$$\lambda \ll a, \quad (9.33)$$

т.е. длина волны де Бройля должна быть достаточно малой.

Условие перехода к классической механике (9.31) можно записать в другой форме, если учесть, что $p = \sqrt{2m(E - U)}$, $p^2 = 2m(E - U)$. Дифференцируя последнее выражение, получим

$$p \frac{dp}{dx} = -\frac{m}{p} \frac{dU}{dx}.$$

С учетом (9.30) будем иметь

$$\frac{m\hbar}{p^3} \left| \frac{dU}{dx} \right| \ll 1, \quad (9.34)$$

т.е. изменение потенциальной энергии от точки к точке должно быть достаточно медленным, когда на расстоянии порядка дебройлевской длины волны не происходит заметного изменения импульса. Это означает возможность классического рассмотрения квантово-механических систем при движении частиц с большими импульсами в потенциальном поле с малыми градиентами.

Считая, что изменение длины волны происходит в области действия силового поля с конечной протяженностью a , можно с учетом (9.32) написать

$$E \gg \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \quad (9.35)$$

Используем эту формулу для качественных оценок применимости условия перехода к классической механике. Например, в случае α -частиц ($m = 6,7 \cdot 10^{-24}$ г) с энергией $E = 1$ МэВ, пролетающих через атомную оболочку ($a \sim 10^{-8}$ см), неравенство (9.35) выполняется достаточно хорошо. Но для тех же α -частиц с энергией $E = 10$ МэВ, испытывающих соударение с атомным ядром ($a \sim 10^{-13}$ см), классическое описание становится непригодным.

3. Теоремы Эренфеста. Принцип причинности в квантовой механике

В 1927 г. Пауль Эренфест доказал теоремы, согласно которым уравнения движения классической механики сохраняются в квантовой механике для средних значений механических величин.

1. Вычислим среднее значение величины $\frac{dx}{dt}$ в некотором состоянии Ψ . Согласно (8.4), полагая $L = x$, имеем

$$\overline{\frac{dx}{dt}} = \frac{d}{dt}(\bar{x}) = \int \Psi^* \frac{d\hat{x}}{dt} \Psi dx. \quad (9.36)$$

Учитывая, что координата является величиной, не зависящей явно от времени ($\frac{\partial \hat{x}}{\partial t} = 0$), согласно квантовому уравнению Гамильтона (8.17) имеем

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \{\hat{H}, \hat{x}\} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{1}{i\hbar} (\hat{x}\hat{H} - \hat{H}\hat{x}). \quad (9.37)$$

Для вычисления коммутатора, входящего в правую часть (9.37), найдем результат его действия на волновую функцию:

$$\begin{aligned} (\hat{x}\hat{H} - \hat{H}\hat{x})\Psi &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} x \nabla^2 + xU + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 x - Ux \right) \Psi = \\ \frac{\hbar^2}{2m} \{ \nabla^2(x\Psi) - x\nabla^2\Psi \} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\Psi) - x \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} \right\} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial\Psi}{\partial x}. \end{aligned}$$

Снимая волновую функцию, получаем

$$\hat{x}\hat{H} - \hat{H}\hat{x} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x}. \quad (9.38)$$

Подставляя этот результат в (9.37), будем иметь

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hat{p}_x}{m}.$$

Согласно (9.36)

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \int \Psi^* \frac{\hat{p}_x}{m} \Psi dx = \frac{\bar{p}_x}{m},$$

откуда следует первая теорема Эренфеста:

$$\boxed{\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{\bar{p}_x}{m}}. \quad (9.39)$$

Аналогичный результат получается для координат y, z .

Таким образом, скорость и импульс в квантовой механике связаны между собой таким же соотношением, как и в классической механике, но только для средних значений.

2. Среднее значение от величины $\frac{dp_x}{dt}$ в некотором состоянии Ψ согласно (8.4) определяется выражением

$$\overline{\frac{dp_x}{dt}} = \frac{d\bar{p}_x}{dt} = \int \Psi^* \frac{d\hat{p}_x}{dt} \Psi dx. \quad (9.40)$$

Поскольку p_x не зависит явно от времени, в соответствии с правилом дифференцирования оператора по времени (8.5) получаем

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{1}{i\hbar} (\hat{p}_x \hat{H} - \hat{H} \hat{p}_x). \quad (9.41)$$

Вычислим коммутатор $(\hat{p}_x \hat{H} - \hat{H} \hat{p}_x)$:

$$\begin{aligned} (\hat{p}_x \hat{H} - \hat{H} \hat{p}_x) \Psi &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \Psi + i\hbar \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \frac{\partial \Psi}{\partial x} = -i\hbar \Psi \frac{\partial U}{\partial x}, \\ (\hat{p}_x \hat{H} - \hat{H} \hat{p}_x) &= -i\hbar \frac{\partial U}{\partial x}. \end{aligned} \quad (9.42)$$

Подставляя (9.42) в (9.41), получим

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x}. \quad (9.43)$$

Но $\left(-\frac{\partial U}{\partial x}\right)$ есть оператор проекции силы, поэтому (9.43) можно переписать в виде

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = \hat{F}_x. \quad (9.44)$$

Проводя усреднение по состоянию Ψ , получим

$$\frac{d\overline{p_x}}{dt} = \frac{d}{dt}(\overline{p_x}) = \int \Psi^* \hat{p}_x \Psi dx = -\frac{\partial \overline{U}}{\partial x} = \overline{F}_x,$$

то есть

$$\boxed{\frac{d\overline{p_x}}{dt} = \overline{F}_x}. \quad (9.45)$$

Соотношение (9.45) представляет собой вторую теорему Эренфеста: производная от среднего значения импульса $\overline{p_x}$ равна средней силе \overline{F}_x . Аналогичный результат получается для двух других проекций.

Подставляя $\overline{p_x}$ из (9.39) в (9.45), получаем следующее уравнение

$$m\ddot{\overline{x}} = \overline{F}_x, \quad (9.46)$$

которое представляет собой второй закон Ньютона для средних значений.

Таким образом, в квантовой механике средние значения координат и импульсов частицы, а также действующей на нее силы, связаны между собой уравнениями, аналогичными соответствующим уравнениям классической механики. Из теорем Эренфеста следует, что классическая форма причинности сохраняется в квантовой механике для средних значений.

В классической механике состояние системы можно задать с помощью набора координат и импульсов (или скоростей). Лаплас утверждал, что если в любой момент времени заданы положения и скорости каждой частицы Вселенной, то зная действующие силы, можно предсказать не только будущее, но и прошлое всей Вселенной. Это – классическая форма причинности, или классический (лапласовский) детерминизм. Олицетворением классического детерминизма является второй закон Ньютона.

В квантовой механике в соответствии с соотношением неопределенностей микрочастицы не могут иметь одновременно определенную координату и соответствующую проекцию импульса. Отсюда возможен ошибочный вывод о нарушении принципа причинности: если состояние системы не определено в начальный момент времени, то невозможно предсказать и ее последующие состояния. На самом деле, меняется само понятие состояния микрообъекта, которое, в отличие от классической физики, задается с помощью волновой функции. Квадрат ее модуля определяет плотность вероятности обнаружения частицы в той или иной точке пространства.

Если в начальный момент времени задана волновая функция $\Psi(\vec{r}, 0)$ и известны испытываемые частицей взаимодействия (т.е. задан гамильтониан), то с помощью уравнения Шрёдингера можно однозначно определить волновую функцию в любой другой момент времени $\Psi(\vec{r}, t)$, а значит, и соответствующую плотность вероятности. Поэтому олицетворением причинности в квантовой механике является уравнение Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi.$$

Неслучайно Макс Планк отмечал, что в микромире причинность так же безраздельно царствует, как и в макромире.



Пауль Эренфест
(1880–1933)

Австрийский и нидерландский физик-теоретик, ученик Л. Больцмана.

Член Нидерландской королевской академии наук, член-корреспондент Академии наук СССР (1924), иностранный член Датской академии наук (1933).

Создатель крупной научной школы.

В 1907–1912 работал в Санкт-Петербурге, способствовал развитию теоретической физики в России.

С 1912 по 1933 гг. возглавлял кафедру теоретической физики в Лейденском университете, став преемником Г.А. Лоренца.

Имеет труды по термодинамике, статистической механике, теории относительности, квантовой теории. Предложил первую классификацию фазовых переходов.

Сформулировал адиабатическую гипотезу в квантовой теории.

Ввел термин «ультрафиолетовая катастрофа» в проблеме равновесного теплового излучения.

Сыграл роль «первой скрипки» в становлении гипотезы о спине электрона.

Установил связь между квантовой и классической механикой, доказав теоремы Эренфеста.

Известные ученики: С. Гаудсмит, Г Уленбек, Х. Казимир, Х. Крамерс.

А. Эйнштейн об Эренфесте:

«Его величие заключалось в чрезвычайно хорошо развитой способности улавливать самое существо теоретического понятия и настолько освобождать теорию от её математического наряда, что лежащая в её основе простая идея проявлялась со всей ясностью. Эта способность позволяла ему быть бесподобным учителем. По этой же причине его приглашали на научные конгрессы, ибо в обсуждения он всегда вносил изящество и чёткость. Он боролся против расплывчатости и многословия; при этом пользовался своей пронизательностью и бывал откровенно неучтив. Некоторые его выражения могли быть истолкованы как высокомерные, но его трагедия состояла именно в почти болезненном неверии в себя. Он постоянно страдал от того, что его критические способности опережали способности конструктивные. Критическое чувство обкрадывало, если так можно выразиться, любовь к творению собственного ума даже раньше, чем оно зарождалось.

Он не только был самым лучшим профессором, которого я знал, но его страстно занимали становление и судьба людей, особенно его студентов. Понимать других, завоёвывать их дружбу и доверие, помогать тому, кто был подавлен внешней или внутренней борьбой, ободрять молодые таланты – всё это было его истинным призванием, даже больше, чем углубление научных вопросов».

Основные выводы по теме № 2.

1. Отметим 5 основных постулатов квантовой механики:

I. Состояние микрочастицы описывается с помощью волновой функции Ψ (или вектора состояния $|\Psi\rangle$ в гильбертовом пространстве). Квадрат модуля $|\Psi|^2$ определяет вероятность обнаружить частицу в данной точке пространства или вероятность того или иного результата измерения.

II. Каждой динамической переменной L ставится в соответствие линейный самосопряженный оператор \hat{L} .

III. Результатом измерения физической величины L может быть только одно из собственных значений этой величины (постулат единственности собственного значения).

IV. Вероятность получить собственное значение ℓ_n при измерении в состоянии Ψ равна

$$W_n = |c_n|^2,$$

где c_n – коэффициенты в разложении Ψ по ортонормированному базису (по полной системе собственных функций Ψ_n данного оператора \hat{L}):

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n, \quad c_n = \langle \Psi_n | \Psi \rangle.$$

Определением среднего значения механической величины является

$$\bar{L} = \int_V \Psi^* \hat{L} \Psi dV = \langle \Psi | \hat{L} | \Psi \rangle.$$

V. Эволюция вектора состояния описывается уравнением Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi.$$

2. Сопоставление классической и квантовой механики

Таблица 1

№	Классическая механика	Квантовая механика
1	2	3
1	Описание состояния с помощью $2s$ переменных: s обобщенных координат q_α и s обобщенных импульсов p_α (s – число степеней свободы, $\alpha = 1, 2, 3, \dots, s$)	Задание волновой функции полностью определяет свойства системы в данном состоянии. Квадрат модуля волновой функции дает плотность вероятности найти частицу в определенном месте пространства
2	Динамические переменные (координата, импульс, момент импульса, энергия и др.) представляются числовыми значениями	Каждой динамической переменной сопоставляется линейный самосопряженный оператор
3	Непрерывность изменения динамических переменных	Возможность дискретных (квантованных) значений динамических переменных при финитном движении
4	Возможность одновременного точного определения механических величин, в частности, канонически сопряженных координат q_α и импульсов p_α . В любом состоянии в данный момент времени частица имеет определенные значения координаты x и импульса p_x	Одновременно точно в данном квантовом состоянии определяются только величины, операторы которых коммутируют. Координата x и импульс p_x изображаются некоммутирующими операторами $[x, \hat{p}_x]_- = i\hbar$. Неопределенности координаты и импульса связаны неравенством Гейзенберга $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$, которое указывает на пределы применимости этих классических понятий
6	Интенсивность волнового процесса пропорциональна квадрату амплитуды: $\mathcal{J} \sim A^2$	Интенсивность волн де Бройля пропорциональна вероятности найти частицу в данной точке пространства: $\mathcal{J} \sim \Psi ^2$
7	Полная механическая энергия, т.е. функция Гамильтона $H = \frac{p^2}{2m} + U = T + U$	Оператор энергии, т.е. гамильтониан $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U$

Продолжение таблицы 1

1	2	3
8	<p>Классическая функция действия</p> $S_0(\vec{r}, t) = \int_0^t L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t') dt'$ <p>является действительной величиной</p>	<p>Квантовое обобщение функции действия является комплексной величиной:</p> $S = S_1 + iS_2$
9	<p>Классическое уравнение Гамильтона–Якоби:</p> $-\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{(\nabla S_0)^2}{2m} + U(\vec{r})$	<p>Квантовое обобщение уравнения Гамильтона–Якоби:</p> $-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\nabla S)^2}{2m} + U - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S$
10	<p>Три формулировки классической механики: механика Ньютона, формализм Лагранжа, формализм Гамильтона</p>	<p>Формулировки нерелятивистской квантовой механики: волновая механика Шрёдингера, матричная механика Гейзенберга, векторная формулировка Дирака, фейнмановская формулировка (интегралы по траекториям)</p>
11	<p>Уравнения движения:</p> <p>а) в формулировке Ньютона</p> $m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{F};$ <p>б) в формулировке Лагранжа</p> $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0;$ <p>в) в формулировке Гамильтона</p> $\dot{q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \quad \dot{p}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}$	<p>Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики – уравнение Шрёдингера:</p> $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$
12	<p>Уравнение непрерывности для плотности потока частиц</p> $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div} \vec{j}$	<p>Уравнение непрерывности для плотности тока вероятности</p> $\frac{\partial w}{\partial t} = -\text{div} \vec{j}_w$
13	<p>Классическая форма причинности связывает между собой точные значения динамических переменных:</p> $m\dot{x} = p_x, \quad \dot{p}_x = F_x$	<p>Соотношения причинности в квантовой механике сохраняются для средних значений в соответствии с теоремами Эренфеста:</p> $m\dot{\bar{x}} = \bar{p}_x, \quad \dot{\bar{p}}_x = \bar{F}_x$

1	2	3
14	Классические скобки Пуассона: $(H, L) = \sum_{\alpha=1}^s \left(\frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial L}{\partial q_{\alpha}} - \frac{\partial L}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} \right).$	Квантовые скобки Пуассона: $\{\hat{H}, \hat{L}\} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H})$
15	Правило дифференцирования динамической переменной по времени: $\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial t} + (H, L)$	Правило дифференцирования оператора динамической переменной по времени: $\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \{\hat{H}, \hat{L}\}$
16	Законы сохранения выполняются для точных значений. Законы сохранения импульса, момента импульса и энергии являются следствиями свойств симметрии пространства и времени	Законы сохранения выполняются для средних значений. Наряду с законами сохранения импульса, момента импульса и энергии, являющимися следствием свойств симметрии пространства и времени, появляются дополнительные законы сохранения, соответствующие дискретным преобразованиям симметрии

3. Основные формулы математического аппарата квантовой механики:

Таблица 2

1	Волновая функция де Бройля для свободной частицы	$\Psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)}$
2	Принцип суперпозиции состояний	$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$
3	Плотность вероятности	$w = \Psi ^2$
4	Плотность тока вероятности	$\vec{j}_w = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$
5	Определение самосопряженного (эрмитового) оператора	$\int_V \Psi_1^* \hat{L} \Psi_2 dV = \int_V (\hat{L} \Psi_1)^* \Psi_2 dV;$ $\hat{L} = \hat{L}^+$

Окончание таблицы 2

6	Оператор импульса	$\hat{p} = -i\hbar \nabla, \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
7	Оператор момента импульса	$\hat{K} = -i\hbar[\vec{r}\nabla], \hat{K}_x = (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)$
8	Оператор энергии (гамильтониан)	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U$
9	Условие ортонормировки волновых функций	$\int_V \Psi_m^* \Psi_n dV = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{при } m = n, \\ 0 & \text{при } m \neq n. \end{cases}$
10	Определение среднего значения динамической переменной	$\bar{L} = \int_V \Psi^* \hat{L} \Psi dV = \langle \Psi \hat{L} \Psi \rangle$
11	Коммутатор операторов	$[\hat{M}, \hat{L}]_- = \hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M}; [x, \hat{p}_x]_- = i\hbar$
12	Неравенство Гейзенберга	$\Delta M \cdot \Delta L \geq \frac{ \langle \hat{C} \rangle }{2}; \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$
13	Соотношения неопределенностей Гейзенберга	$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar; \Delta x \cdot \Delta k_x \geq 2\pi;$ $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar; \Delta v \cdot \Delta t \geq 1$
14	Уравнение Шрёдингера в общем виде	$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi;$ $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$
15	Стационарное уравнение Шрёдингера	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi = E\Psi;$ $\hat{H}\Psi = E\Psi$
16	Квантовые уравнения Гамильтона	$\frac{d\hat{x}}{dt} = \{\hat{H}, \hat{x}\}; \frac{d\hat{p}_x}{dt} = \{\hat{H}, \hat{p}_x\}$
17	Правило дифференцирования оператора по времени	$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \{\hat{H}, \hat{L}\}$

4. Сопоставление понятий теории линейных операторов и понятий квантовой механики

МАТЕМАТИКА	КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА
<p>1. Линейный оператор \hat{L}</p> <p>2. Собственные значения ℓ (характеристические числа)</p> <p>3. Собственная функция Ψ для собственного значения (характеристического числа) ℓ</p> <p>4. Коммутативность операторов</p> <p>5. Квадрат модуля $\Psi ^2 = \Psi \cdot \Psi^*$</p> <p>6. Нормировка</p> $\int_V \Psi ^2 dV = 1$ <p>7. Ортогональность</p> $\int \Psi^* \varphi dV = 0$ <p>8. Интеграл</p> $\int_V \Psi^* \hat{L} \Psi dV$	<p>1. Физическая величина L</p> <p>2. Наблюдаемые значения физической величины</p> <p>3. Вектор состояния механической системы, в котором $L = \ell$</p> <p>4. Одновременная наблюдаемость физических величин</p> <p>5. Плотность вероятности</p> <p>6. Сумма вероятностей равна 1</p> <p>7. Состояния Ψ и φ несовместны, $\langle \Psi \varphi \rangle = 0$</p> <p>8. Среднее значение величины L в квантовом состоянии Ψ</p>

ТЕМА 3. ОДНОМЕРНЫЕ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЕ ЗАДАЧИ

Уравнение Шрёдингера (5.13) допускает точные решения для небольшого числа сравнительно простых потенциальных полей. В данной теме будут рассмотрены некоторые задачи одномерного движения в постоянных полях, приводящие к простым аналитическим выражениям для функций состояния квантовой системы. С помощью моделей, отражающих существенные черты того или иного квантового объекта, будут установлены особенности поведения микрочастиц, существенно отличающиеся от свойств классических частиц.

Лекция 10. Частица в потенциальном ящике

1. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме

Потенциальное поле, удерживающее частицу в ограниченной области пространства, можно моделировать потенциальной ямой бесконечной глубины (рис. 34). В одномерном случае потенциальная яма с идеально отражающими стенками описывается потенциальной энергией следующего вида

$$U = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < x < l, \\ \infty & \text{при } x \leq 0, x \geq l. \end{cases} \quad (10.1)$$

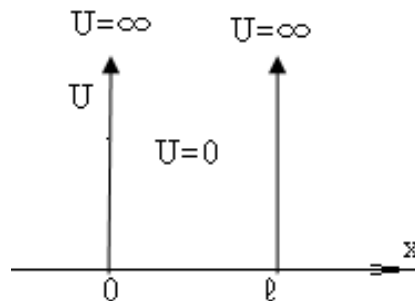


Рис 34. Прямоугольная потенциальная яма

Физически эти условия означают, что частица не может покинуть область от 0 до ℓ , поскольку на границах этой области действует бесконечно большая возвращающая сила.

Стационарное уравнение Шрёдингера для одномерного движения вдоль оси x имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + U(x)\Psi = E\Psi. \quad (10.2)$$

Умножив обе части этого уравнения на $\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)$, получим следующее уравнение, описывающее движение частицы внутри ямы ($U = 0$)

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0. \quad (10.3)$$

Учитывая, что согласно (4.6)

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} = k^2, \quad (10.4)$$

где k – волновое число, получаем следующее уравнение

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0. \quad (10.5)$$

Его решение имеет вид

$$\Psi = A\sin kx + B\cos kx. \quad (10.6)$$

Для нахождения коэффициентов A и B воспользуемся граничными условиями:

$$\Psi(0) = 0, \quad \Psi(\ell) = 0. \quad (10.7)$$

Полагая в (10.6) $x = 0$, получаем

$$0 = A\sin 0 + B\cos 0 = B, \text{ т.е. } B = 0.$$

Подставляя в (10.6) $x = \ell$, находим

$$0 = A\sin k\ell.$$

Это возможно, если $k\ell = n\pi$, т.е.

$$k = \frac{n\pi}{\ell}, \quad (10.8)$$

где квантовое число $n = 1, 2, 3, \dots$

Таким образом, решением уравнения (10.3) является система собственных функций

$$\Psi_n = A \sin \frac{n\pi}{\ell} x, \quad (10.9)$$

описывающих возможные стационарные состояния частицы в потенциальном ящике.

Зная возможные значения волнового числа (10.8), с помощью (10.4) определим уровни энергии частицы

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8m\ell^2}. \quad (10.10)$$

Таким образом, при движении частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками имеет место квантование энергетического спектра. Диаграмма уровней энергии частицы в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме с идеально отражающими стенками представлена на рис. 35. Энергия любого n -го уровня связана с энергией основного состояния формулой

$$E_n = n^2 E_1, \quad (10.11)$$

где

$$E_1 = \frac{h^2}{8m\ell^2} \quad (10.12)$$

есть минимальная энергия микрочастицы.

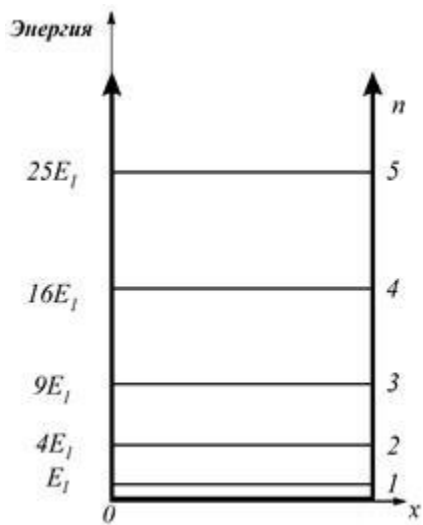


Рис. 35. Диаграмма уровней энергии частицы в потенциальной яме

Заметим, что квантование энергии получено как естественное следствие граничных условий (10.7) в рамках трех стандартных условий, накладываемых на волновую функцию (конечность, однозначность, непрерывность). Полученный результат согласуется с решением волнового уравнения Даламбера (при отсутствии временной зависимости), известным из курса математической физики. По существу здесь решена задача Штурма–Лиувилля о нахождении собственных значений дифференциального уравнения второго порядка и соответствующих собственных функций.

Наличие минимальной, отличной от нуля, энергии E_1 частицы в ящике согласуется с неравенством Гейзенберга для координаты и импульса

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (10.13)$$

Полагая $p_{min} = \Delta p_x$, находим наименьшее возможное значение энергии частицы в ящике

$$E_{min} = \frac{p_{min}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2}. \quad (10.14)$$

Из (10.10) следует, что расстояние между соседними уровнями энергии частицы в яме увеличивается с ростом номера квантового состояния:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = n \frac{\hbar^2}{4m\ell^2}. \quad (10.15)$$

Не противоречит ли это принципу соответствия, согласно которому в области больших квантовых чисел должен наблюдаться предельный переход к квазинепрерывному спектру, подобно тому, как это имеет место в теории водородоподобного атома? На самом деле, противоречия нет. Чтобы убедиться в этом, вычислим относительное изменение энергии

$$\left. \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} \right|_{n \gg 1} = \left. \frac{1}{n} \right|_{n \gg 1} \rightarrow 0. \quad (10.16)$$

Таким образом, в области больших квантовых чисел принцип соответствия выполняется.

Для определения окончательного вида волновых функций найдем амплитуду A из условия нормировки

$$\int_0^{\ell} \Psi_n^* \Psi_n dx = \int_0^{\ell} |\Psi_n|^2 dx = 1,$$

$$\int_0^{\ell} \sin^2 \frac{n\pi}{\ell} dx = \frac{1}{2} A^2 \int_0^{\ell} \left(1 - \cos 2 \frac{n\pi}{\ell} x\right) dx = \frac{1}{2} A^2 \ell.$$

Таким образом, имеем

$$A = \sqrt{\frac{2}{\ell}},$$

$$\boxed{\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{n\pi}{\ell} x.} \quad (10.17)$$

В таблице 3 приведены собственные функции и собственные значения для нескольких первых квантовых состояний. Эти результаты очень напоминают известные решения для колебаний струны с закрепленными концами, которые представляют собой стоячие волны. Случай $n = 1$ соответствует основному тону, случай $n = 2$ – первой гармонике, случай $n = 3$ – второй гармонике и т.д.

Таблица 3

n	Ψ_n	E_n
1	$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{\pi}{\ell} x$	$E_1 = \frac{h^2}{8m\ell^2}$
2	$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{2\pi}{\ell} x$	$E_2 = 4E_1$
3	$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{3\pi}{\ell} x$	$E_3 = 9E_1$

На рисунке 36 приведены графики собственных функций (10.17) и квадраты их модулей, дающих распределение вероятности найти частицу в том или ином месте внутри ящика при различных значениях её энергии.

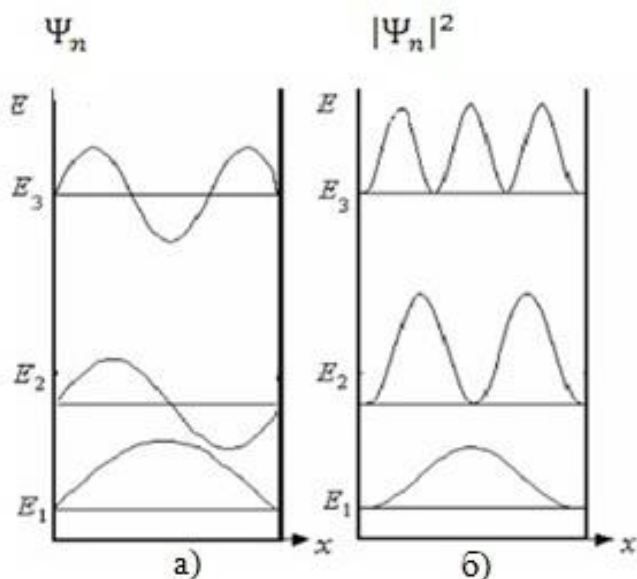


Рис. 36. Графики собственных функций (а) и распределение плотности вероятности (б) нахождения частицы в потенциальной яме

Из рис. 36 видно, что в основном состоянии ($n = 1$) волновая функция Ψ_1 не имеет узлов, кроме точек на границах ямы, при этом частица с наибольшей вероятностью находится близко к середине ямы, а вероятность ее нахождения у стенок равна нулю. Узлы представляют собой точки, где вероятность нахождения частицы равна нулю. С ростом квантового числа n (а, следовательно, и энергии частицы) возрастает число узлов и пучностей, максимумы кривых $|\Psi_n|^2$ располагаются все ближе друг к другу, в результате при больших квантовых числах ($n \gg 1$) распределение вероятностей приближается к равномерному, характерному для классической частицы. Таким образом, мы снова видим, что в области больших квантовых чисел выполняется принцип соответствия.

Если сдвинуть начало координат в точку $x = \ell/2$, то в новой системе отсчета волновая функция будет иметь вид

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{n\pi}{\ell} \left(x + \frac{\ell}{2}\right) = \begin{cases} (-1)^{\frac{n}{2}} \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{n\pi}{\ell} x, & n = 2, 4, 6 \dots \\ (-1)^{n-1} \sqrt{\frac{2}{\ell}} \cos \frac{n\pi}{\ell} x, & n = 1, 3, 5 \dots \end{cases} \quad (10.18)$$

Таким образом, получаются два класса функций: четные и нечетные. Четные функции (при нечетном n) не меняют знак при изменении направления оси Ox ($x \rightarrow -x$), а нечетные функции (при четном значении квантового числа n) меняют знак на противоположный. Соответственно, четность в первом случае $\lambda_p = 1$, во втором случае $\lambda_p = -1$. Четность есть величина сохраняющаяся, как было отмечено в лекции 8.

Сформулируем выводы из рассмотренной задачи.

1. Микрочастица в бесконечно глубокой потенциальной яме имеет дискретный энергетический спектр. При этом число собственных значений энергии бесконечно.
2. Наличие у частицы минимальной, неравной нулю энергии является следствием волновых свойств.
3. Чем меньше масса частицы и чем меньше область ее локализации (ℓ), тем большей энергией обладает частица в данном стационарном состоянии. Этим, в частности, можно объяснить, почему электроны не могут входить в состав атомного ядра ($\ell \sim 10^{-13}$ см). В то же время протоны и нейтроны, масса которых превышает массу электрона в 1836 раз, входят в состав ядра.
4. В области больших квантовых чисел ($n \gg 1$) выполняется принцип соответствия (т.е. переход к классическому поведению): частица практически с одинаковой вероятностью может находиться в любой точке потенциального ящика.

Примерами реализации рассмотренной модели являются движение электронов в металле и нуклонов в атомных ядрах.

2. Одномерная яма конечной глубины

Выберем зависимость потенциальной энергии от расстояния в следующем виде (рис. 37):

$$U = \begin{cases} \infty & \text{при } x \leq 0, \\ 0 & \text{при } 0 < x < l, \\ U_0 & \text{при } x \geq l. \end{cases} \quad (10.19)$$

Поскольку при $x < 0$ потенциальная энергия обращается в бесконечность, частица не может проникнуть в эту область. Поэтому задача сводится к отысканию волновой функции при $x > 0$.

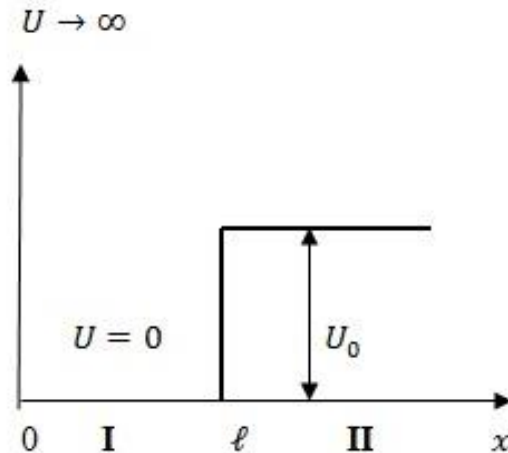


Рис. 37. Потенциальная яма конечной глубины

Запишем уравнение Шрёдингера в областях I и II:

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_1 = 0, \quad (10.20)$$

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}\Psi_2. \quad (10.21)$$

Рассмотрим два случая.

1) $E > U_0$.

В области I уравнение Шрёдингера имеет вид

$$\Psi_1'' + k_1^2 \Psi_1 = 0, \text{ где } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (10.22)$$

В области II

$$\Psi_2'' + k_2^2 \Psi_2 = 0, \text{ где } k_2^2 = \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}. \quad (10.23)$$

Решения для каждой из этих областей можно записать следующим образом:

$$\Psi_1 = A_1 \sin k_1 x + B_1 \cos k_1 x, \quad (10.24)$$

$$\Psi_2 = A_2 \sin k_2 (x - \ell) + B_2 \cos k_2 (x - \ell). \quad (10.25)$$

Используя граничное условие $\Psi_1(0) = 0$, находим, что $B_1 = 0$. Условия непрерывности функции и ее первой производной в точке $x = \ell$

$$\Psi_1(\ell) = \Psi_2(\ell), \quad (10.26)$$

$$\Psi_1'(\ell) = \Psi_2'(\ell) \quad (10.27)$$

приводят к следующим выражениям

$$A_2 = \frac{A_1 k_1}{k_2} \cos k_1 \ell, B_2 = A_1 \sin k_1 \ell. \quad (10.28)$$

Эти условия всегда могут быть выполнены, поэтому энергетический спектр при инфинитном движении является непрерывным.

2) $E < U_0$.

Уравнение Шрёдингера для области I остается без изменений. Чтобы записать его для области II, учтем, что в рассматриваемом случае

$$k_2 = \sqrt{-\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} = ik, \quad (10.29)$$

где

$$k = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (10.30)$$

Таким образом, с учетом того, что волновое число k_2 оказывается мнимым, уравнение Шрёдингера в области II запишется в виде

$$\Psi_2'' - k^2 \Psi_2 = 0. \quad (10.31)$$

Решениями для областей I и II являются функции

$$\Psi_1 = A_1 \sin k_1 x, \quad (10.32)$$

$$\Psi_2 = C_2 e^{ik_2 x} = C_2 e^{-kx}. \quad (10.33)$$

Условия «сшивания» (10.26) и (10.27) принимают вид

$$A_1 \sin k_1 \ell = C_2 e^{-k\ell}, \quad A_1 k_1 \cos k_1 \ell = -k C_2 e^{-k\ell}. \quad (10.34)$$

Разделив почленно второе уравнение на первое, получим условие квантования энергии:

$$ctg k_1 \ell = -\frac{k}{k_1}. \quad (10.35)$$

Решение этого уравнения находится графическим методом. Заметим, что

$$\sin k_1 \ell = \frac{1}{\sqrt{1 + ctg^2 k_1 \ell}} = \sqrt{\frac{E}{U_0}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\ell^2 U_0}} k_1 \ell.$$

Введем следующее обозначение: $y = k_1 \ell$, тогда уравнение (10.35) принимает вид

$$\sin y = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\ell^2 U_0}} y. \quad (10.36)$$

Его решениями являются точки пересечения синусоиды $z = \sin y$ с прямой $z = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\ell^2 U_0}} y$. При этом следует выбирать только те точки, которые согласуются со знаком в уравнении (10.35), т.е. те, которые принадлежат четным четвертям (рис. 38).

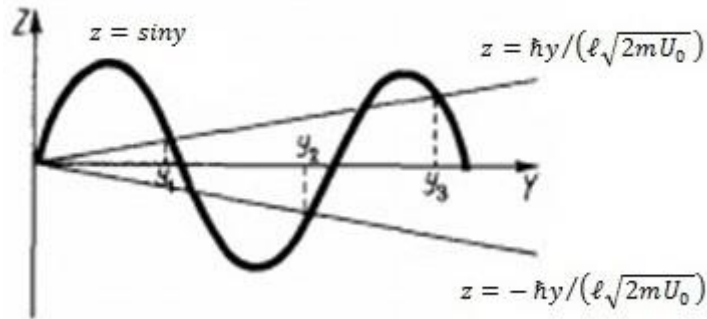


Рис. 38. Графическое решение уравнения (10.36)

В результате получится конечное число значений y_n , которым соответствует конечное число собственных значений энергии

$$E_n = \frac{\hbar^2 y_n^2}{2m\ell^2}. \quad (10.37)$$

В случае ямы малой глубины может оказаться, что ни одного собственного значения энергии не существует.

Из решения (10.33) следует, что имеется экспоненциально убывающая с ростом x , но конечная, вероятность нахождения частицы с энергией $E < U_0$ в области $x > l$. Этот эффект означает возможность прохождения микрочастицы через потенциальный барьер.

Основные выводы из рассмотренной задачи:

1. При инфинитном (неограниченном) движении микрочастицы ее энергетический спектр является непрерывным. При ограниченном (финитном) движении энергетический спектр является дискретным.
2. В потенциальной яме конечной глубины имеется конечное число собственных значений энергии. Если глубина ямы слишком мала, то возможна ситуация, когда ни одного собственного значения энергии не существует.
3. В случае потенциальной ямы конечной глубины существует отличная от нуля вероятность проникновения частицы в область, где $E < U_0$.

Лекция 11. Линейный гармонический осциллятор

Линейный гармонический осциллятор (ЛГО) является одной из важных моделей, используемых в квантовой механике. Такой осциллятор представляет собой квантовый аналог частицы, совершающей малые линейные колебания около положения равновесия под действием квазиупругой силы. Примером малых колебаний в атомных системах являются колебания атомов в молекулах. Совокупностью линейных гармонических осцилляторов можно моделировать колебания кристаллической решетки. В квантовой электродинамике электромагнитное поле рассматривается как суперпозиция независимых квантовых осцилляторов.

Потенциальная энергия ЛГО равна

$$U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (11.1)$$

где $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ – частота колебаний осциллятора. График потенциальной энергии представляет собой параболу (рис. 39).

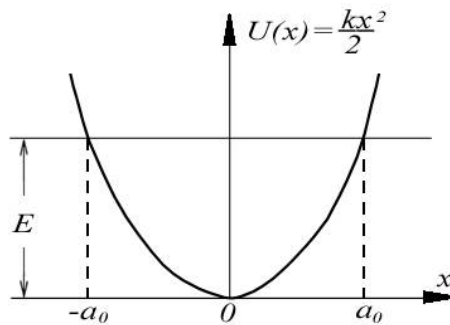


Рис. 39. Потенциальная кривая ЛГО

Напомним основные свойства классического линейного гармонического осциллятора.

1. Непрерывность значений энергии

$$E = E_{\text{кин.}} + U.$$

2. Макроскопический осциллятор колеблется в области, ограниченной точками поворота ($-a_0 \leq x \leq a_0$), в которых кинетическая энергия обращается в нуль, так что полная энергия совпадает с потенциальной.

3. Состояние с наименьшей энергией классического ЛГО – это состояние покоя, при котором $E = 0$.

Значение задачи о ЛГО в классической физике выходит далеко за пределы механики. Достаточно напомнить модель упруго связанного электрона, совершающего гармонические колебания, которая лежит в основе модели атома Томсона и классической электронной теории Г.А. Лоренца.

1. Квантовое обобщение уравнения Гамильтона–Якоби для линейного гармонического осциллятора. Энергия и волновая функция основного состояния ЛГО

Квантово-механическое решение задачи сводится к нахождению энергетического спектра и распределения вероятностей нахождения ЛГО в различных точках пространства в разных квантовых состояниях. По аналогии с задачей о частице в потенциальном ящике можно было бы рассмотреть стоячие волны, возникающие внутри области $-a_0 \leq x \leq a_0$. Однако в математическом отношении задача оказывается сложнее вследствие того, что потенциальная энергия не является постоянной величиной, изменяясь по параболическому закону. Не остается постоянной величиной и длина волны де Бройля $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m(E-U)}}$. Тем не менее для финитного движения осциллятора заранее можно предсказать дискретный характер его энергетического спектра.

Уравнение Шрёдингера для задачи о ЛГО имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + U(x)\Psi = E\Psi.$$

При подстановке в это уравнение волновой функции

$$\Psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}S(x,t)} \tag{11.2}$$

получается КОУГЯ (см. лекцию 9)

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 + U - \frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2S}{dx^2} = E, \quad (11.3)$$

которое полностью эквивалентно уравнению Шрёдингера. При введении функции

$$f = \frac{dS}{dx} \quad (11.4)$$

происходит понижение порядка уравнения (11.3), в результате чего оно становится дифференциальным уравнением первого порядка:

$$-\frac{i\hbar}{2m} \frac{df}{dx} + \frac{1}{2m} f^2 + U = E. \quad (11.5)$$

Запишем это уравнение для функции f_0 основного состояния

$$-\frac{i\hbar}{2m} \frac{df_0}{dx} + \frac{1}{2m} f_0^2 + U = E_0. \quad (11.6)$$

С учетом (11.1) оно принимает вид

$$-\frac{i\hbar}{2m} \frac{df_0}{dx} + \frac{1}{2m} f_0^2 + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = E_0. \quad (11.7)$$

Правая часть уравнения (11.7) не зависит от x , т.е. является постоянной величиной. Поэтому и его левая часть должна быть равна той же самой константе. Этому требованию удовлетворяет следующая функция:

$$f_0 = \alpha x, \quad (11.8)$$

где α – постоянный коэффициент. Действительно, подставляя (11.8) в (11.7), получаем

$$-\frac{i\hbar}{2m} \alpha + \frac{1}{2m} \alpha^2 x^2 + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = E_0.$$

Это уравнение выполняется, если

$$E_0 = -\frac{i\hbar}{2m} \alpha, \quad (11.9)$$

$$\frac{1}{2m} \alpha^2 x^2 + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = 0. \quad (11.10)$$

Положительный корень уравнения (11.10) имеет вид

$$\alpha = i m \omega. \quad (11.11)$$

В этом случае

$$f_0 = im\omega x, \quad (11.12)$$

и энергия ЛГО является положительной величиной

$$\boxed{E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}}. \quad (11.13)$$

Найдем волновую функцию основного состояния. Согласно (11.2)

$$\Psi_0 = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_0\right). \quad (11.14)$$

В соответствии с (11.4) в этом состоянии

$$\frac{dS_0}{dx} = im\omega x.$$

Интегрируя это выражение, находим, что

$$S_0 = im\omega \frac{x^2}{2} + const, \quad (11.15)$$

т.е. функция S_0 , в отличие от классической функции действия, является комплексной величиной:

$$S_0 = S_1 + iS_2.$$

Подставляя (11.15) в (11.14), получаем волновую функцию основного состояния ЛГО:

$$\Psi_0 = C_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}, \quad (11.16)$$

где C_0 – постоянный множитель (амплитуда волновой функции), который определяется из условия нормировки. Функцию Ψ_0 можно записать в другом виде, если ввести величину

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad (11.17)$$

физический смысл которой мы обсудим несколько позднее. С учетом (11.17) волновая функция основного состояния ЛГО принимает следующий вид:

$$\boxed{\Psi_0 = C_0 e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}}. \quad (11.18)$$

Из (11.18) видно, что Ψ_0 удовлетворяет условию конечности:

$$\Psi(\infty) = \Psi(-\infty) = 0,$$

это подтверждает правильность выбора положительного корня уравнения (11.10). Нетрудно убедиться, что отрицательное значение $\alpha = -i\tau\omega$ привело бы к физически неразумному отрицательному значению полной энергии ЛГО и к экспоненциально возрастающей зависимости $\Psi_0(x)$, противоречащей стандартному требованию конечности волновой функции.

Распределение вероятности нахождения ЛГО в той или точке x для основного квантового состояния определяется формулой

$$|\Psi_0|^2 = C_0^2 e^{-\frac{x^2}{x_0^2}}. \quad (11.19)$$

Графики для классической и квантовой вероятностей местонахождения осциллятора в состоянии с наименьшей энергией представлены на рис. 40.

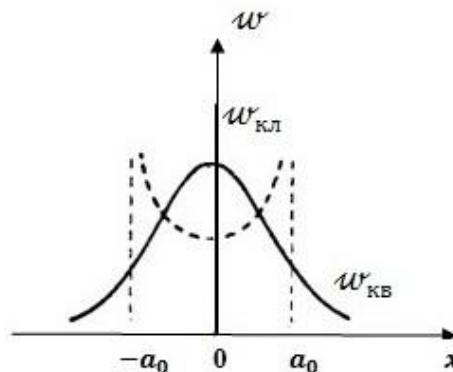


Рис. 40. Классическая и квантовая вероятности для основного состояния ЛГО

В классической теории наименьшая энергия осциллятора соответствует частице, покоящейся в положении равновесия. Вероятность в этом случае всюду равна нулю, кроме точки $x = 0$ (прямая вдоль оси ординат). Для движущейся частицы наибольшая вероятность соответствует точкам поворота (пунктирная линия с минимумом в начале координат).

В квантовой теории наименьшая энергии осциллятора отлична от нуля. Эта энергия называется нулевой энергией, согласно (11.13) она равна $\frac{\hbar\omega}{2}$. Т.е. квантовый осциллятор не может находиться в состоянии покоя. Даже при абсолютном

нуле температуры атомы колеблются, но не за счет теплового движения, а за счет волновых свойств. Именно в состоянии с наименьшей энергией выявляется резкое противоречие между квантово-механическим и классическим описанием микрообъектов.

Из рис. 40 видно, что в основном состоянии ЛГО с наибольшей вероятностью находится в начале координат. По мере удаления от точки $x = 0$ вероятность убывает по экспоненциальному закону и при $x = x_0$ уменьшается в $e \approx 2.7$ раз (т.е. почти в 3 раза). Это расстояние, равное x_0 , называется шириной волновой функции основного состояния ЛГО.

Наличие нулевой энергии есть прямое следствие неравенства Гейзенберга

$$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p_x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (11.20)$$

Действительно, средние значения \bar{x} и $\overline{p_x}$ в состоянии с определенной энергией равны нулю:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* x \Psi_n dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n x \Psi_n dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \Psi_n^2 dx = 0 \quad (11.21)$$

(в силу нечетности подынтегральной функции),

$$\overline{p_x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* \hat{p}_x \Psi_n dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n \frac{\partial \Psi_n}{\partial x} dx = \left[-\frac{i\hbar}{2} \Psi_n^2 \right]_{-\infty}^{+\infty} = 0. \quad (11.22)$$

Поэтому

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} - (\bar{x})^2 = \overline{x^2}, \quad (11.23)$$

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{p_x^2} - (\overline{p_x})^2 = \overline{p_x^2} \quad (11.24)$$

и неравенство Гейзенберга принимает вид

$$\overline{x^2} \cdot \overline{p_x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (11.25)$$

Средняя энергия осциллятора равна

$$\bar{E} = \frac{\overline{p_x^2}}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \overline{x^2}. \quad (11.26)$$

С учетом (11.25) получаем из (11.26)

$$\bar{E} \geq \frac{\overline{p_x^2}}{2m} + \frac{m\omega^2 \hbar^2}{8\overline{p_x^2}}. \quad (11.27)$$

Обозначив $y = \overline{p_x^2}$, получим из (11.27)

$$\bar{E} \geq \frac{y}{2m} + \frac{m\omega^2 \hbar^2}{8y}. \quad (11.28)$$

Используя условие минимума энергии

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial y} = 0,$$

находим из (11.28), что

$$\bar{E}_{min} = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (11.29)$$

Таким образом, нулевая энергия есть наименьшая энергия, совместимая с неравенством Гейзенберга.

Существование нулевых колебаний, обусловленных волновыми свойствами микрообъектов, – это фундаментальное следствие квантово-механического описания природы. Они присущи любой частице, находящейся в потенциальной яме (в случае ЛГО – в параболической потенциальной яме). Имеется целый ряд экспериментальных доказательств существования нулевых колебаний. Например, гелий при нормальных условиях существует в жидкой фазе вплоть до абсолютного нуля температуры. Поэтому жидкий гелий представляет собой квантовую жидкость. Следствием нулевых колебаний является невозможность существования одномерных кристаллов: даже при $T = 0$ нулевые колебания атомов оказываются настолько сильными, что они разрушают дальний порядок в их расположении, необходимый для кристаллического состояния вещества. Нулевые колебания обнаруживаются также в опытах по рассеянию кристаллами рентгеновского излучения, нейтронов и γ -квантов. Существование нулевой энергии позволяет дать объяснение сил Ван-дер-Ваальса, действующих между нейтральными атомами и молекулами (Приложение IV).

Благодаря успехам нанотехнологий удастся экспериментально наблюдать нулевые колебания макроскопических механических осцилляторов микрометровых размеров. При милликельвиновых температурах эти осцилляторы находятся в нулевом состоянии, и наблюдаются квантовые переходы между основным и первым возбужденным состояниями.

2. Энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний ЛГО. Распределение вероятностей местонахождения осциллятора

Мы уже определили энергию основного квантового состояния осциллятора. Каково следующее допустимое значение его энергии? Чтобы ответить на этот вопрос, запишем по аналогии с уравнением (11.6) уравнение для функции f_1 , а затем вычтем из получившегося уравнения исходное уравнение (11.6):

$$\begin{aligned}
 & -\frac{i\hbar}{2m} \frac{df_1}{dx} + \frac{1}{2m} f_1^2 + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = E_1 \\
 - & \\
 & -\frac{i\hbar}{2m} \frac{df_0}{dx} + \frac{1}{2m} f_0^2 + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = E_0,
 \end{aligned}$$

получим:

$$-\frac{i\hbar}{2m} \frac{d}{dx} (f_1 - f_0) + \frac{1}{2m} (f_1^2 - f_0^2) = E_1 - E_0.$$

Полагая

$$f_1 = f_0 + \Delta f_1, \tag{11.30}$$

приходим к уравнению относительно Δf_1 :

$$-\frac{i\hbar}{2m} \frac{d}{dx} (\Delta f_1) + i\omega x (\Delta f_1) + \frac{(\Delta f_1)^2}{2m} = E_1 - E_0. \tag{11.31}$$

В правой части этого уравнения стоит постоянная величина, не зависящая от x , поэтому левая часть должна быть равна той же самой константе. Решением уравнения (11.31) является

$$\Delta f_1 = -\frac{i\hbar}{x}, \quad (11.32)$$

в чем можно убедиться непосредственной подстановкой (11.32) в (11.31). При этом получается следующий результат:

$$\hbar\omega = E_1 - E_0,$$

то есть

$$\boxed{E_1 = E_0 + \hbar\omega}. \quad (11.33)$$

Первое возбужденное состояние ЛГО отстоит от энергии основного состояния на величину кванта $\hbar\omega$.

Для любого n -го состояния, по аналогии с (11.31), будет иметь место следующее уравнение относительно Δf_n :

$$-\frac{i\hbar}{2m} \frac{d}{dx} (\Delta f_n) + i\omega x (\Delta f_n) + \frac{(\Delta f_n)^2}{2m} = E_n - E_0. \quad (11.34)$$

где

$$f_n = f_0 + \Delta f_n. \quad (11.35)$$

Решением уравнения (11.34) является функция

$$\Delta f_n = -\frac{i\hbar}{\nu_n} \frac{d\nu_n}{dx} = -i\hbar d(\ln \nu_n), \quad (11.36)$$

где $\nu_n = \nu_n(x)$.

Нетрудно видеть, что при $\nu_n = x$ функция (11.36) совпадает с (11.32). Далее учтем, что

$$\frac{d}{dx} (\Delta f_n) = -i\hbar \left\{ \frac{1}{\nu_n} \frac{d^2 \nu_n}{dx^2} - \frac{1}{\nu_n^2} \left(\frac{d\nu_n}{dx} \right)^2 \right\}. \quad (11.37)$$

Подставив (11.36) и (11.37) в (11.34), получаем следующее уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m\nu_n} \frac{d^2 \nu_n}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{2m\nu_n^2} \left(\frac{d\nu_n}{dx} \right)^2 + \frac{\hbar\omega x}{\nu_n} \frac{d\nu_n}{dx} - \frac{\hbar^2}{2m\nu_n^2} \left(\frac{d\nu_n}{dx} \right)^2 = E_n - E_0. \quad (11.38)$$

Второй и четвертый члены этого уравнения взаимно сокращаются. Домножив обе части (11.38) на $\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right) \psi_n$, получаем следующее уравнение

$$\frac{d^2 \psi_n}{dx^2} - 2 \frac{m\omega}{\hbar} x \frac{d\psi_n}{dx} + \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - E_0) \psi_n = 0. \quad (11.39)$$

Введем новую переменную:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x = \frac{x}{x_0}, \quad (11.40)$$

где величина x_0 определена в (11.17).

Чтобы перейти к новой переменной в уравнении (11.39), вычислим производные:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_n}{dx} &= \frac{d\psi_n}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \frac{1}{x_0} \frac{d\psi_n}{d\xi}, \\ \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} &= \frac{d}{dx} \frac{d\psi_n}{dx} = \frac{d}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} \frac{1}{x_0} \frac{d\psi_n}{d\xi} = \frac{1}{x_0^2} \frac{d^2 \psi_n}{d\xi^2}. \end{aligned}$$

Тогда уравнение (11.39) примет вид

$$\frac{1}{x_0^2} \frac{d^2 \psi_n}{d\xi^2} - 2 \frac{\xi}{x_0^2} \frac{d\psi_n}{d\xi} + \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - E_0) \psi_n = 0.$$

Умножив обе части этого уравнения на x_0^2 , получим

$$\psi_n'' - 2\xi \psi_n' + \frac{2}{\hbar\omega} (E_n - E_0) \psi_n = 0. \quad (11.41)$$

Уравнение (11.41) представляет собой дифференциальное уравнение второго порядка следующего вида:

$$y'' - 2xy' + 2ny = 0. \quad (11.42)$$

Из курса «Математическая физика» известно, что такому же уравнению подчиняются полиномы Эрмита–Чебышева:

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0. \quad (11.43)$$

Здесь $H_n(\xi)$ есть полином степени n , который определяется дифференциальной формулой

$$\boxed{H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2})}. \quad (11.44)$$

Из сравнения (11.42) и (11.43) следует, что

$$\nu_n = H_n, \quad \frac{E_n - E_0}{\hbar\omega} = n. \quad (11.45)$$

поэтому

$$E_n - E_0 = n\hbar\omega, \\ \boxed{E_n = E_0 + n\hbar\omega}. \quad (11.46)$$

Этот результат согласуется с формулой (11.33), которая получается из (11.46) при $n = 1$.

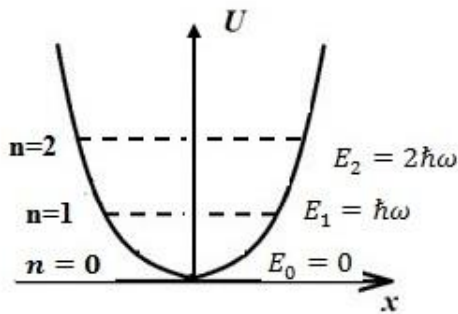
Таким образом, ЛГО имеет эквидистантный энергетический спектр. Разность энергий соседних уровней составляет одну и ту же величину $\Delta E = \hbar\omega$. Учитывая выражение для энергии нулевых колебаний (11.13), получаем из (11.46)

$$\boxed{E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), n = 0, 1, 2, 3, \dots} \quad (11.47)$$

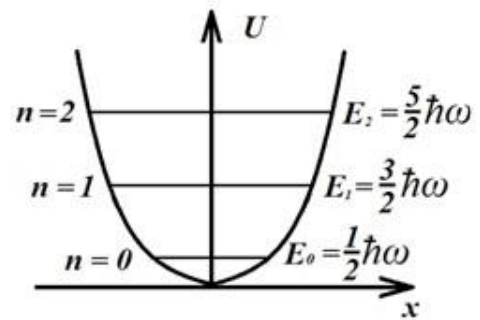
Эта формула позволяет рассчитать энергию любого n -го стационарного состояния осциллятора. Вычислим энергию нескольких возбужденных состояний:

$$n = 1, E_1 = \frac{3}{2} \hbar\omega; \\ n = 2, E_2 = \frac{5}{2} \hbar\omega; \\ n = 3, E_3 = \frac{7}{2} \hbar\omega .$$

Сравнение (11.47) с формулой Планка (1.25) показывает, что каждый уровень энергии, вычисленный с помощью КОУГЯ, эквивалентного уравнению Шрёдингера, отличается от планковского на величину нулевой энергии (рис. 41). Следовательно, спектр Планка (1.25) правильно описывает процессы излучения и поглощения энергии осциллятором, но не учитывает нулевые колебания, обусловленные волновыми свойствами микрообъектов.



а) Диаграмма уровней ЛГО согласно гипотезе Планка



б) Диаграмма уровней энергии ЛГО в волновой (квантовой) механике

Рис. 41. Энергетический спектр линейного гармонического осциллятора

Определим волновые функции стационарных состояний осциллятора.

Для этого выпишем необходимые формулы, установленные ранее:

$$\Psi = e^{\frac{i}{\hbar}S},$$

$$f_n = \frac{dS_n}{dx} = f_0 + \Delta f_n = f_0 - \frac{i\hbar}{v_n} \frac{dv_n}{dx}.$$

Таким образом, имеем

$$\frac{dS_n}{dx} = im\omega x - \frac{i\hbar}{v_n} \frac{dv_n}{dx}. \quad (11.48)$$

Интегрируя данное выражение, получим

$$S_n = im\omega \frac{x^2}{2} - i\hbar \ln v_n + const. \quad (11.49)$$

С учетом (11.49) получается следующее выражение для волновых функций:

$$\Psi_n = C_n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \cdot v_n.$$

С учетом (11.40) и (11.45) окончательно получаем

$$\boxed{\Psi_n = C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \cdot H_n(\xi)}. \quad (11.50)$$

Коэффициенты C_n определяются из условия нормировки волновых функций.

В таблице 4 представлены результаты решения задачи об осцилляторе для нескольких низших состояний.

Таблица 4

n	$H_n(\xi)$	Ψ_n (ненормиров.)	$ \Psi_n ^2$	E_n
0	1	$e^{-\frac{\xi^2}{2}}$	$e^{-\xi^2}$	$\frac{\hbar\omega}{2}$
1	2ξ	$2\xi \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}}$	$e^{-\xi^2}$	$\frac{3}{2}\hbar\omega$
2	$4\xi^2 - 2$	$(4\xi^2 - 2) \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}}$	$(4\xi^2 - 2)^2 \cdot e^{-\xi^2}$	$\frac{5}{2}\hbar\omega$
n	$(-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2})$	$e^{-\frac{\xi^2}{2}} \cdot H_n(\xi)$	$H_n^2 e^{-\xi^2}$	$\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$

Графики волновых функций и распределения вероятности нахождения осциллятора в разных точках пространства для разных n представлены на рис. 42.

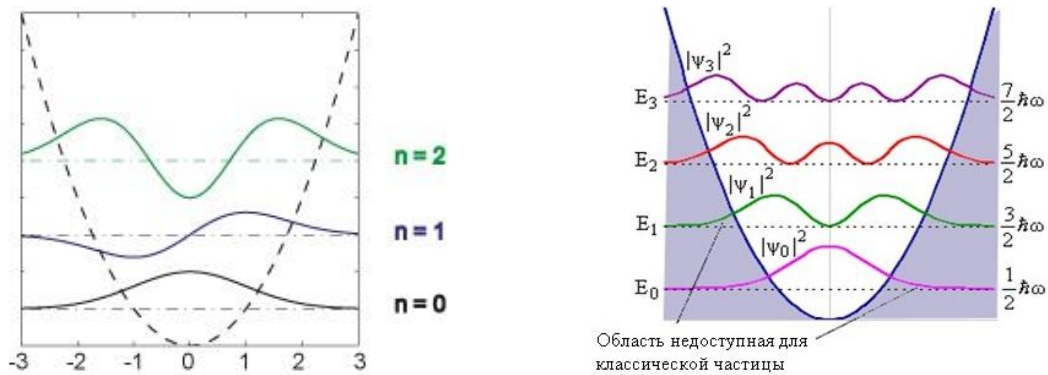


Рис. 42. Волновые функции (слева) и распределение вероятности (справа) местонахождения осциллятора

Проанализируем поведение собственных функций и распределение вероятностей по координатам ЛГО.

1. Конечность, непрерывность и однозначность волновых функций в интервале $-\infty < \xi < +\infty$ обеспечивается наличием многочлена конечной n – й степени

(полинома Эрмита-Чебышева) $H_n(\xi)$ и экспоненциальным множителем $e^{-\frac{\xi^2}{2}}$, который стремится к нулю при $\xi \rightarrow \pm\infty$.

2. Волновые функции ЛГО удовлетворяют осцилляционной теореме:

«Функция $\Psi_n(x)$, соответствующая $(n + 1)$ -му по величине собственному значению E_n , обращается в нуль при конечных значениях x n раз». Действительно, функция Ψ_0 , соответствующая основному состоянию осциллятора $n = 0$, нулей не имеет. Функция Ψ_1 , отвечающая уровню $n = 1$, имеет один нуль (в начале координат). Волновая функция Ψ_2 ($n = 2$) обращается в нуль два раза и т.д. Точки, в которых волновая функция обращается в нуль, называются узлами волновой функции. Число узлов равно квантовому числу n .

3. В основном состоянии ($n = 0$) осциллятор с наибольшей вероятностью находится в начале координат. При $n = 1$ имеются две точки ($\xi = \pm 1$), в которых имеется наибольшая вероятность нахождения осциллятора. Т.е. при малых квантовых числах квантовый осциллятор ведет себя совсем иначе, чем классический. При увеличении n квантовое распределение вероятности приближается к классическому: в области больших квантовых чисел осциллятор с наибольшей вероятностью находится вблизи классических точек поворота (рис. 43), т.е. выполняется принцип соответствия.

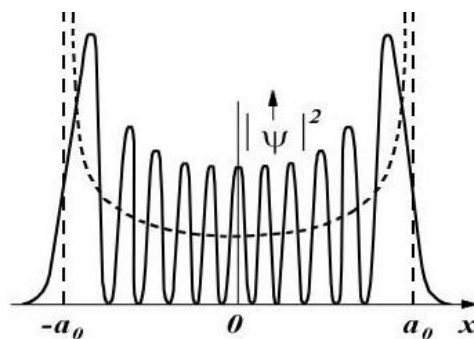


Рис. 43. Распределение плотности вероятности местонахождения осциллятора при больших квантовых числах

4. В отличие от классического случая, имеется конечная вероятность найти частицу за пределами точек поворота, где потенциальная энергия больше полной (т.е. в области, запрещенной в классической механике). Это означает возможность туннельного эффекта в квантовой механике.

3. Нормировка волновых функций осциллятора

Условие нормировки имеет вид

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* \Psi_n dx = x_0 C_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_n(\xi) d\xi = 1. \quad (11.51)$$

Подставляя в это выражение вместо одного полинома $H_n(\xi)$ замкнутый вид (11.44), получим:

$$(-1)^n x_0 C_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) d\xi = 1. \quad (11.52)$$

Далее применим правило переброса производной с одной функции на другую, т.е. совершим n раз интегрирование по частям, в результате получим:

$$(-1)^{2n} x_0 C_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} H_n(\xi) d\xi = 1. \quad (11.53)$$

Учтем, что полином Эрмита–Чебышева может быть представлен в виде конечно-го степенного ряда:

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2\xi)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} (2\xi)^{n-4} + \dots \quad (11.54)$$

Согласно (11.54)

$$\frac{d^n}{d\xi^n} H_n(\xi) = 2^n n! \quad (11.55)$$

Подставляя (11.55) в (11.53), получаем следующее выражение

$$x_0 C_n^2 2^n n! \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = 1. \quad (11.56)$$

Интеграл, содержащийся в этой формуле, есть интеграл Пуассона

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}. \quad (11.57)$$

Из (11.56) с учетом (11.57) получаем коэффициент C_n :

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}}}. \quad (11.58)$$

Таким образом, нормированные волновые функции осциллятора имеют вид

$$\Psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \cdot H_n(\xi). \quad (11.59)$$

Например, для волновой функции основного состояния будем иметь

$$\Psi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (11.60)$$

4. Правила отбора для ЛГО

Вначале установим рекуррентное соотношение между полиномами Эрмита–Чебышева. Найдем производную

$$\begin{aligned} \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} (e^{-\xi^2}) &= \frac{d^n}{d\xi^n} \frac{d}{d\xi} (e^{-\xi^2}) = -2 \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2} \cdot \xi) = -2 (e^{-\xi^2} \cdot \xi)^{(n)} \\ &= -2 (u \cdot v)^{(n)}. \end{aligned}$$

Учитывая формулу Лейбница

$$(u \cdot v)^{(n)} = u^{(n)} v^0 + n u^{(n-1)} v^{(1)} + \frac{n(n-1)}{2} u^{(n-2)} v^{(2)} + \dots + u^{(0)} v^{(n)},$$

получим

$$(e^{-\xi^2})^{(n+1)} = -2 \left[(e^{-\xi^2})^{(n)} \cdot \xi + n (e^{-\xi^2})^{(n-1)} \cdot 1 \right].$$

Умножая обе части этой формулы на $(-1)^{(n+1)} e^{\xi^2}$, получаем рекуррентное соотношение, связывающее между собой полиномы H_{n+1}, H_n, H_{n-1} :

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2n H_{n-1}. \quad (11.61)$$

Используя формулу (11.61), вычислим следующее произведение:

$$\begin{aligned} x\Psi_n &= x_0 C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \xi H_n = x_0 C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left(\frac{1}{2} H_{n+1} + n H_{n-1} \right) = \\ &= x_0 C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left(\frac{1}{2} \frac{\Psi_{n+1}}{C_{n+1}} e^{\frac{\xi^2}{2}} + n \frac{\Psi_{n-1}}{C_{n-1}} e^{\frac{\xi^2}{2}} \right). \end{aligned}$$

Учитывая (11.58), находим, что

$$C_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}(n+1)! x_0 \sqrt{\pi}}}, \quad C_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{2^{n-1}(n-1)! x_0 \sqrt{\pi}}}.$$

Поэтому

$$x\Psi_n = x_0 \left(\sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}} \Psi_{n-1} \right). \quad (11.62)$$

Полученная формула позволяет вычислить отличные от нуля матричные элементы:

$$\langle \Psi_m | x | \Psi_n \rangle = x_0 \left(\sqrt{\frac{n+1}{2}} \langle \Psi_m | \Psi_{n+1} \rangle + \sqrt{\frac{n}{2}} \langle \Psi_m | \Psi_{n-1} \rangle \right).$$

Учитывая условие ортонормировки волновых функций

$$\langle \Psi_m | \Psi_{n+1} \rangle = \delta_{m,n+1}, \quad \langle \Psi_m | \Psi_{n-1} \rangle = \delta_{m,n-1}, \quad (11.63)$$

получаем

$$\langle \Psi_m | x | \Psi_n \rangle = x_0 \left(\sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} \right). \quad (11.64)$$

Из (11.64) следует, что матричные элементы будут отличны от нуля в двух случаях:

- 1) $m = n + 1$, если $\delta_{m,n+1} = 1$;
- 2) $m = n - 1$, если $\delta_{m,n-1} = 1$.

Обозначив $m = n'$, приходим к правилам отбора для квантового числа n :

$$n' = n - 1, \quad n' = n + 1, \quad (11.65)$$

или

$$\boxed{\Delta n = \pm 1}. \quad (11.66)$$

Правила отбора (11.65), (11.66) означают, что для осциллятора возможны квантовые переходы только между соседними энергетическими уровнями (рис. 44).

При этом отличные от нуля матричные элементы определяются выражениями

$$x_{n-1,n} = \langle \Psi_{n-1} | x | \Psi_n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n}{2}},$$

$$x_{n+1,n} = \langle \Psi_{n+1} | x | \Psi_n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}}. \quad (11.67)$$

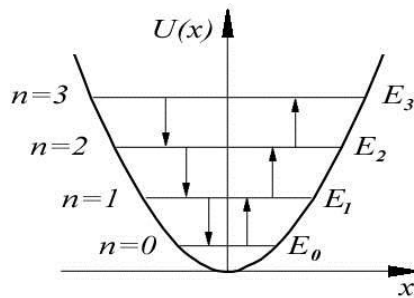


Рис. 44. Правила отбора, разрешающие переходы только между соседними уровнями энергии

Используя ненулевые матричные элементы координаты, можно получить энергетический спектр осциллятора (11.47). Сначала установим связь энергии с неопределенностью координаты в классической физике. Уравнение движения классического осциллятора имеет вид:

$$\ddot{x} = -\omega^2 x.$$

Решением этого уравнения является

$$x = A \sin \omega t.$$

При этом неопределенность координаты

$$\Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - (\bar{x})^2} = \sqrt{A^2 \sin^2 \omega t} = \sqrt{\frac{1}{2} A^2},$$

так что

$$(\Delta x)^2 = \frac{A^2}{2} \cdot \frac{k}{k} = \frac{1}{k} \cdot \frac{kA^2}{2}.$$

Амплитуда $A = x_{max}$, т.е. вблизи точек поворота

$$(\Delta x)^2 = \frac{E}{k},$$

поэтому

$$E = k(\Delta x)^2. \quad (11.68)$$

Связь энергии и Δx в квантовой механике сохранится для средних значений, поэтому необходимо найти $(\bar{x})^2$:

$$(\bar{x})^2 = \langle n|x \cdot x|n \rangle = \sum_m \langle n|x|m \rangle \langle m|x|n \rangle.$$

С учетом (11.67) получаем

$$\begin{aligned} (\bar{x})^2 &= \langle n|x|n-1 \rangle \langle n-1|x|n \rangle + \langle n|x|n+1 \rangle \langle n+1|x|n \rangle = \\ &= |x_{n-1,n}|^2 + |x_{n+1,n}|^2 = x_0^2 \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (11.69)$$

Из (11.68) и (11.69) следует формула для энергетического спектра (11.47)

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Лекция 12. Прохождение микрочастицы через потенциальный барьер

1. Движение частицы в поле «потенциальной ступеньки»

Рассмотрим поведение частицы на границе двух областей I и II, где потенциальная энергия меняется скачком:

$$U = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0, \\ U_0 & \text{при } x \geq 0. \end{cases} \quad (12.1)$$

Представляют интерес два случая: а) полная энергия частицы превышает ее потенциальную энергию ($E > U_0$) в области II (рис. 45) и б) полная энергия меньше потенциальной энергии ($E < U_0$) (рис. 46).

а) Надбарьерное рассеяние ($E > U_0$).

Если полная энергия частицы $E > U_0$, то в классической механике такая частица обязательно перейдет из области I в область II. В квантовой механике поведение частицы будет совершенно иное. Ее движение описывается плоской волной де Бройля.

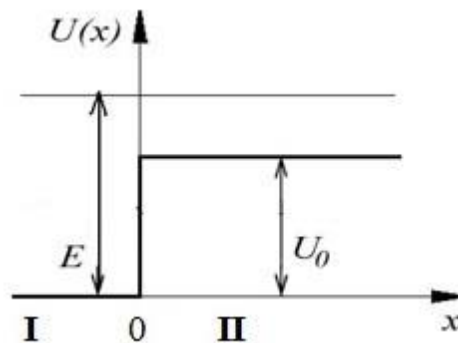


Рис. 45. Надбарьерное рассеяние

На границе двух областей, где происходит внезапное изменение потенциальной энергии, эта волна должна вести себя подобно световой волне на границе двух областей с различным показателем преломления. Поэтому на границе

областей I и II волна де Бройля частично отражается и частично проходит в область II. Т.е. существует определенная вероятность надбарьерного рассеяния и определенная вероятность прохождения в область II.

Запишем уравнение Шрёдингера для каждой из двух областей:

$$\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_1 = 0, \quad (12.2)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \Psi_2 = 0. \quad (12.3)$$

Введем обозначения

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (12.4)$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}, \quad (12.5)$$

где k_1 и k_2 – волновые числа в области I и в области II. Тогда уравнения (12.2) и (12.3) перепишутся следующим образом

$$\Psi_1'' + k_1^2 \Psi_1 = 0, \quad (12.6)$$

$$\Psi_2'' + k_2^2 \Psi_2 = 0. \quad (12.7)$$

Решениями этих уравнений являются функции

$$\Psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad (12.8)$$

$$\Psi_2 = A_2 e^{ik_2 x}. \quad (12.9)$$

В области I, где частица является свободной ($U = 0$), волновая функция представляет собой суперпозицию двух волн – падающей волны $e^{ik_1 x}$ (идущей слева направо) и отраженной волны $e^{-ik_1 x}$, а в области II распространяется только проходящая волна $e^{ik_2 x}$. Коэффициент A_1 – это амплитуда падающей волны, поэтому его можно положить равным 1 (вероятность нахождения частицы в падающей волне $|A_1|^2 = 1$). Коэффициент B_1 – амплитуда отраженной волны, A_2 – амплитуда волны, прошедшей во вторую область.

В случае волны де Бройля плотность тока вероятности согласно (5.29) определяется формулой

$$\vec{j}_w = |\Psi|^2 \frac{\vec{p}}{m}.$$

Поэтому для падающей, отраженной и прошедшей волн будем иметь следующие выражения:

$$j_{\text{пад}} = \frac{\hbar k_1}{m}, \quad j_{\text{отр}} = |B_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m}, \quad j_{\text{прош}} = |A_2|^2 \frac{\hbar k_2}{m}. \quad (12.10)$$

Коэффициент отражения R определим следующим образом:

$$R = \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}} = |B_1|^2. \quad (12.11)$$

Коэффициент прозрачности D определим как отношение прошедшего и падающего потоков:

$$D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}} = |A_2|^2 \frac{k_2}{k_1}. \quad (12.12)$$

С корпускулярной точки зрения коэффициент R можно рассматривать как вероятность частице испытать отражение на границе областей, а коэффициент D – как вероятность «просочиться» в область II, т.е. как вероятность преодолеть потенциальный барьер.

Для вычисления этих вероятностей воспользуемся граничными условиями. Необходимо наложить требование непрерывности волновых функций и их первых производных на границе областей I и II (в точке 0):

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0), \quad (12.13)$$

$$\Psi_1'(0) = \Psi_2'(0). \quad (12.14)$$

Тогда будем иметь:

$$1 + B_1 = A_2,$$

$$ik_1 - ik_1 B_1 = ik_2 A_2.$$

После деления обеих частей второго уравнения на ik_1 получаем систему двух уравнений с двумя неизвестными B_1 и A_2 :

$$1 + B_1 = A_2, \quad (12.15)$$

$$1 - B_1 = \frac{k_2}{k_1} A_2. \quad (12.16)$$

Сложив (12.15) с (12.16), получаем выражение для A_2 :

$$A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}. \quad (12.17)$$

Подставляя (12.17) в (12.15), находим B_1 :

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}. \quad (12.18)$$

С учетом (12.11) и (12.12) получаем следующие выражения для коэффициентов отражения и прозрачности:

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad (12.19)$$

$$D = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (12.20)$$

Из (12.19) и (12.20) следует, что

$$R + D = 1, \quad (12.21)$$

что вполне разумно: на границе областей частица либо отразится, либо пройдет дальше в область II.

Учитывая выражения (12.4) и (12.5) для волновых чисел k_1 и k_2 , получаем коэффициенты отражения и прозрачности в зависимости от соотношения между полной энергией E и потенциальной энергией U_0 :

$$R = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}} \right)^2, \quad (12.22)$$

$$D = 4 \frac{\sqrt{1 - U_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - U_0/E})^2}. \quad (12.23)$$

Проанализируем поведение коэффициента отражения R .

- 1) Из (12.22) видно, что при $E > U_0$ коэффициент отражения $R \neq 0$. В отличие от классической механики частица испытывает отражение от потенциальной ступеньки.
- 2) Если $E = U_0$, коэффициент отражения $R = 1$.
- 3) При $E \gg U_0$ формулу (12.22) можно преобразовать к следующему виду:

$$R = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}} \right)^2 \approx \frac{[1 - (1 - U_0/2E)]^2}{(1 + 1 - U_0/2E)^2} \approx (U_0/4E)^2.$$

Из этой формулы следует, что чем больше энергия частицы, тем меньше коэффициент отражения; при $E \rightarrow \infty$ коэффициент отражения $R \rightarrow 0$ и частица с достоверностью перейдет во вторую область.

Теперь рассмотрим поведение коэффициента прозрачности D , пользуясь формулой (12.23).

- 1) Если $E = U_0$, коэффициент прозрачности $D = 0$, проникновение частицы в область II невозможно.
- 2) При $E \gg U_0$ частица с вероятностью, равной единице, окажется в области II. Снова приходим к выводу, что выполняется условие (12.21).

б) Туннельный эффект ($E < U_0$).

Уравнение Шрёдингера в областях I и II можно по-прежнему записать в виде (12.2) и (12.3), однако волновое число k_2 при $E < U_0$ становится мнимым:

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}} = \sqrt{-\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} = ik_0, \quad (12.24)$$

где вещественная часть

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (12.25)$$

Подставляя волновое число (12.24) в формулу (12.9) для волновой функции Ψ_2 , получаем

$$\Psi_2 = A_2 e^{iik_0x} = A_2 e^{-k_0x}. \quad (12.26)$$

Следовательно, вероятность нахождения частицы в области II определяется выражением

$$|\Psi_2|^2 = |A_2|^2 e^{-2k_0x},$$

или

$$|\Psi_2|^2 = A_2^2 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} x}. \quad (12.27)$$

Из (12.27) видно, что имеется вполне определенная вероятность нахождения частицы в области действия потенциала U_0 . И хотя эта вероятность уменьшается по экспоненциальному закону (рис. 47), важно, что она отлична от нуля.

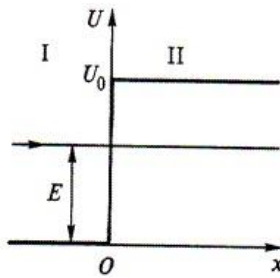


Рис. 46. Туннельный эффект

Следовательно, микрочастица может «просочиться» в классически запрещенную область, что означает возможность квантового туннельного эффекта, который подробно рассматривается далее для случая потенциального барьера конечной ширины.

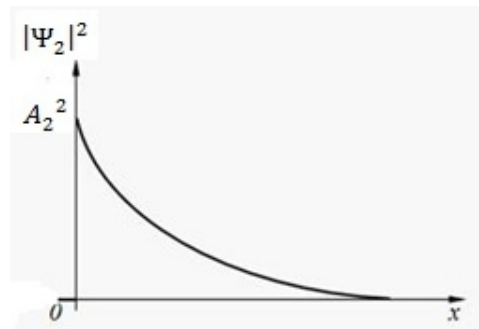


Рис. 47. Плотность вероятности нахождения частицы в области II

2. Прохождение микрочастицы через потенциальный барьер. Туннельный эффект

Потенциальным барьером называется область пространства, где потенциальная энергия больше, чем в окружающих областях пространства. Рассмотрим сначала одномерное движение с потенциальным барьером прямоугольной формы (рис. 48).

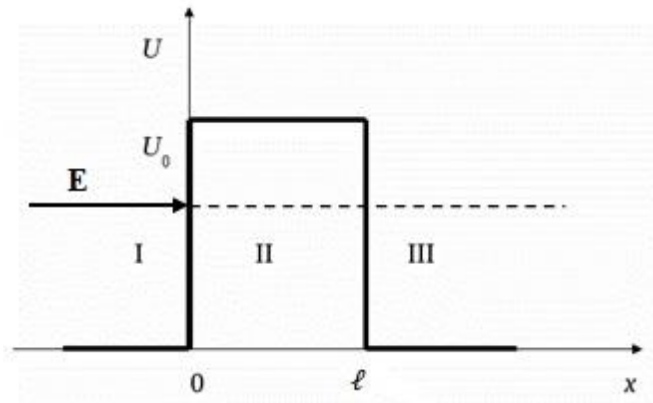


Рис. 48. Потенциальный барьер прямоугольной формы

В этом случае потенциальная энергия определяется следующим образом:

$$U = \begin{cases} 0 & \text{при } -\infty < x < 0, \\ U_0 & \text{при } 0 \leq x \leq l, \\ 0 & \text{при } l < x < \infty. \end{cases} \quad (12.28)$$

В областях I и III частица является свободной ($U = 0$), в области II она движется в силовом поле ($U = U_0 = \text{const}$).

Согласно классической теории при $E < U_0$ частица не сможет оказаться в области II. Она отражается от потенциального барьера, который будет являться абсолютным зеркалом. Действительно, полная механическая энергия частицы

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + U(x),$$

поэтому ее импульс

$$p_x = \pm\sqrt{2m[E - U(x)]} = \begin{cases} \pm 0 & \text{при } E = U_0, \\ \pm i\sqrt{2m(U_0 - E)} & \text{при } E < U_0. \end{cases} \quad (12.29)$$

Частица остановится в точке $x = 0$ и изменит направление своего движения на обратное. В области II ее импульс становится мнимым, что невозможно в классической механике. Таким образом, при $E < U_0$ потенциальный барьер является абсолютным препятствием.

Если же полная энергия частицы больше максимальной потенциальной энергии, $E > U_0$, то частица свободно проходит, потенциальный барьер полностью прозрачен.

Квантовая механика приводит к другим выводам. Имеется некоторая вероятность того, что частица пройдет через барьер при $E < U_0$ и частично отразится от барьера при $E > U_0$. Явление прохождения частицы через потенциальный барьер называется туннельным эффектом. Для преодоления барьера частица не взбирается на его вершину, а проходит под барьером подобно движению через туннель. Преодолев потенциальный барьер, частица оказывается в области III с той же самой энергией, что и в области I. Определим вероятность прохождения через барьер в случае $E < U_0$. Запишем уравнение Шрёдингера для каждой из трех областей:

$$\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_1 = 0, \quad x < 0, \quad U(x) = 0, \quad (12.30)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \Psi_2 = 0, \quad 0 \leq x \leq \ell, \quad U(x) = U_0, \quad (12.31)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_3 = 0, \quad x > \ell, \quad U(x) = 0. \quad (12.32)$$

Введем волновые числа:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \equiv k, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}, \quad k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \equiv k. \quad (12.33)$$

Тогда уравнение Шрёдингера для каждой из рассматриваемых областей принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + k^2 \Psi_1 &= 0, \\ \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + k_2^2 \Psi_2 &= 0, \\ \frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial x^2} + k^2 \Psi_3 &= 0.\end{aligned}$$

В первой и третьей областях волновые числа совпадают, а во второй области волновое число оказывается мнимым:

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}} = \sqrt{-\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} = ik_0. \quad (12.34)$$

Уравнение Шрёдингера и его решения для трех областей пространства представим в виде таблицы:

Таблица 5

	Уравнение Шрёдингера	Общее решение	Решение при $E < U_0$
I	$\Psi_1'' + k^2 \Psi_1 = 0$	$\Psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$	$\Psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$
II	$\Psi_2'' + k_2^2 \Psi_2 = 0$	$\Psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}$	$\Psi_2 = A_2 e^{-k_0 x} + B_2 e^{k_0 x}$
III	$\Psi_3'' + k^2 \Psi_3 = 0$	$\Psi_3 = A_3 e^{ik_3 x} + B_3 e^{-ik_3 x}$	$\Psi_3 = A_3 e^{ikx}$

Здесь A_1 – амплитуда падающей волны, B_1 – амплитуда волны, отраженной от первой стенки ($x = 0$), A_2 – амплитуда волны, прошедшей в область II, B_2 – амплитуда волны, отраженной от второй стенки барьера ($x = \ell$), A_3 – амплитуда волны, прошедшей в область III.

Коэффициент прозрачности потенциального барьера определим как отношение прошедшего в область III и падающего потоков:

$$D = \frac{j_{\text{прош,III}}}{j_{\text{пад,I}}} = \frac{|A_3|^2 \hbar k / m}{|A_1|^2 \hbar k / m} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}. \quad (12.35)$$

Для определения амплитуд A_3 и A_1 используем условия непрерывности волновой функции и ее производной на границах барьера, в точках $x = 0$ и $x = \ell$:

$$\begin{cases} \Psi_1(0) = \Psi_2(0) \\ \Psi_1'(0) = \Psi_2'(0) \end{cases} \quad (12.36)$$

$$\begin{cases} \Psi_2(\ell) = \Psi_3(\ell) \\ \Psi_2'(\ell) = \Psi_3'(\ell). \end{cases} \quad (12.37)$$

Получим следующие уравнения:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ ik(A_1 - B_1) = k_0(B_2 - A_2) \end{cases} \quad (12.38)$$

$$\begin{cases} A_2 e^{-k_0 \ell} + B_2 e^{k_0 \ell} = A_3 e^{ik\ell} \\ k_0(B_2 e^{k_0 \ell} - A_2 e^{-k_0 \ell}) = ik A_3 e^{ik\ell}. \end{cases} \quad (12.39)$$

Вначале определим коэффициенты A_2 и B_2 из системы (12.39). Для этого перепишем (12.39) в следующем виде:

$$\begin{cases} A_2 e^{-k_0 \ell} + B_2 e^{k_0 \ell} = A_3 e^{ik\ell} \\ -A_2 e^{-k_0 \ell} + B_2 e^{k_0 \ell} = \frac{ik}{k_0} A_3 e^{ik\ell}. \end{cases}$$

Очевидно, что

$$A_2 = \frac{\Delta_x}{\Delta}, B_2 = \frac{\Delta_y}{\Delta},$$

где главный определитель

$$\Delta = \begin{vmatrix} e^{-k_0 \ell} & e^{k_0 \ell} \\ e^{-k_0 \ell} & e^{k_0 \ell} \end{vmatrix} = 2.$$

Поэтому получаем

$$A_2 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} A_3 e^{ik\ell} & e^{k_0\ell} \\ \frac{ik}{k_0} A_3 e^{ik\ell} & e^{k_0\ell} \end{vmatrix} = \frac{1}{2} A_3 e^{ik\ell} e^{k_0\ell} \left(1 - \frac{ik}{k_0}\right), \quad (12.40)$$

$$B_2 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} e^{-k_0\ell} & A_3 e^{ik\ell} \\ -e^{-k_0\ell} & \frac{ik}{k_0} A_3 e^{ik\ell} \end{vmatrix} = \frac{1}{2} A_3 e^{ik\ell} e^{-k_0\ell} \left(1 + \frac{ik}{k_0}\right). \quad (12.41)$$

Из (12.40) и (12.41) видно, что $B_2 \ll A_2$, поэтому в системе уравнений (12.38) коэффициентом B_2 можно пренебречь. Таким образом, имеем

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 \\ A_1 - B_1 = \frac{ik_0}{k} A_2. \end{cases}$$

Сложив эти уравнения, получаем формулу для амплитуды A_1

$$A_1 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{ik_0}{k}\right) A_2,$$

или, с учетом (12.40):

$$A_1 = \frac{1}{4} A_3 \left(1 - \frac{ik}{k_0}\right) \left(1 + \frac{ik_0}{k}\right) e^{k_0\ell} e^{ik\ell}.$$

Отсюда следует, что

$$A_3 = \frac{4A_1}{\left(1 - \frac{ik}{k_0}\right) \left(1 + \frac{ik_0}{k}\right)} e^{-k_0\ell} e^{-ik\ell}, \quad (12.42)$$

$$A_3^* = \frac{4A_1^*}{\left(1 + \frac{ik}{k_0}\right) \left(1 - \frac{ik_0}{k}\right)} e^{-k_0\ell} e^{ik\ell}. \quad (12.43)$$

Перемножая (12.42) и (12.43), получаем плотность вероятности нахождения микрочастицы в области за потенциальным барьером

$$|A_3|^2 = \frac{16k^2 k_0^2 |A_1|^2}{(k^2 + k_0^2)^2} e^{-2k_0\ell}. \quad (12.44)$$

Из (12.35) и (12.44) следует, что коэффициент прохождения частицы через потенциальный барьер имеет вид

$$D = \frac{16k^2 k_0^2}{(k^2 + k_0^2)^2} e^{-2k_0 \ell}. \quad (12.45)$$

Подставляя в эту формулу выражения для k и k_0 , получаем следующую формулу для коэффициента прозрачности барьера прямоугольной формы

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \ell}, \quad (12.46)$$

где

$$D_0 = \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2}. \quad (12.47)$$

Из формулы (12.46) следует:

- 1) туннельный эффект – это чисто квантовое явление, обусловленное волновыми свойствами микрообъектов. При $\hbar \rightarrow 0$ коэффициент прозрачности $D \rightarrow 0$;
- 2) проницаемость барьера зависит от его ширины ℓ , от разности между высотой барьера и энергией частицы ($U_0 - E$), а также от ее массы.

Вычислим значение экспоненциального фактора, например, для электрона в случае, когда $U_0 - E \sim 10$ эВ $\sim 10^{-11}$ эрг. Подставляя массу электрона $m = 9.1 \cdot 10^{-28}$ г и постоянную Планка $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-27}$ эрг \cdot с, получаем

$$\exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right\} = \exp\{-10^8\}.$$

Теперь оценим коэффициент прозрачности для двух значений ширины барьера:

- а) $\ell = 1$ см, $D = D_0 \exp\{-10^8\} \rightarrow 0$. Вероятность прохождения электрона через барьер толщиной 1 см чрезвычайно мала.
- б) $\ell = 1 \text{ \AA} = 10^{-8}$ см, $D = D_0 \exp\{-1\} \approx 0,1$. Для барьера шириной порядка атомных размеров коэффициент прозрачности отличен от нуля.

Обобщим формулу (12.46) на случай барьера произвольной формы (рис. 49). Барьер произвольной формы можно представить в виде последовательности потенциальных барьеров прямоугольной формы шириной dx и высотой $U(x)$ (рис. 50).

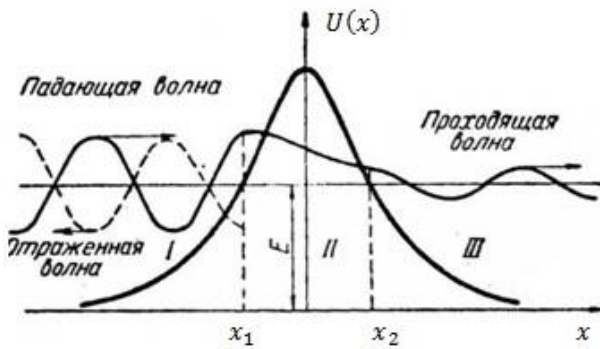


Рис. 49. Барьер произвольной формы

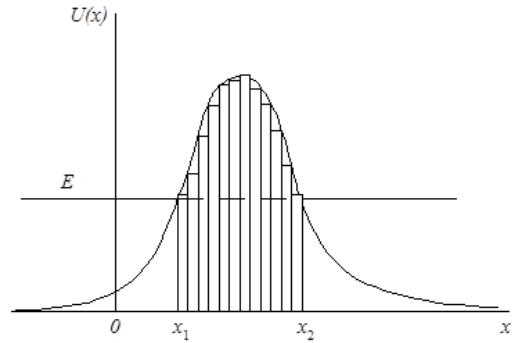


Рис. 50. Совокупность прямоугольных барьеров

Частица с энергией E вступает в барьер в точке $x = x_1$ и выходит из барьера в точке $x = x_2$. Коэффициент прозрачности одного элементарного барьера

$$D_i = D_{0_i} e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx} .$$

Коэффициент прозрачности для всего барьера определится как произведение коэффициентов прозрачности для элементарных прямоугольных барьеров. При этом показатели экспонент сложатся, и мы придем к следующей формуле:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\} . \quad (12.48)$$

Основы квантовой теории туннельного эффекта разработали в 1928 г. Л.И. Мандельштам и М.А. Леонтович.

Остановимся на вопросе о кажущейся парадоксальности туннельного эффекта. С точки зрения классической механики частица не может находиться в области, где $E < U_0$, поскольку прохождение в эту область означало бы нарушение закона сохранения энергии. Такое заключение вытекает из классического представления о полной энергии как суммы кинетической и потенциальной

энергии, которые могут быть определены одновременно точно. Однако в квантовой механике в силу соотношения неопределенностей Гейзенберга нельзя одновременно точно определить координату x и импульс p_x , следовательно, нельзя говорить об одновременных определенных значениях кинетической энергии (как функции импульса) и потенциальной энергии (как функции координат).

Каким способом можно обнаружить частицу внутри потенциального барьера, где $E < U_0$? Ответ дает теория косвенных измерений Мандельштама [21].

Обнаружить частицу внутри потенциального барьера означает измерить ее координату с точностью $\Delta x = \ell$. При этом импульс в соответствии с неравенством Гейзенберга получает неопределенность

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\ell}. \quad (12.49)$$

Этой неопределенности импульса соответствует неопределенность энергии

$$\Delta E = \frac{(\Delta p)^2}{2m}. \quad (12.50)$$

Для ее оценки учтем, что туннельный эффект имеет заметную вероятность, когда

$$\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \ell \sim 1.$$

Отсюда находим, что

$$\ell \sim \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}. \quad (12.51)$$

Из (12.49) и (12.51) следует, что неопределенность импульса

$$\Delta p > \sqrt{2m(U_0 - E)}.$$

Поэтому

$$\frac{(\Delta p)^2}{2m} > U_0 - E. \quad (12.52)$$

Следовательно, изменение кинетической энергии частицы, вносимое вмешательством измерения ее координаты, оказывается больше той энергии, которой ей не достает до высоты барьера U_0 .

Для иллюстрации этого утверждения рассмотрим пример измерения координаты частицы, находящейся внутри потенциального барьера, с помощью пучка света.

Направим узкий пучок света в направлении, перпендикулярном к направлению движения частицы. Если пучок рассеется, значит, на его пути оказалась частица. Точность измерения должна удовлетворять требованию $\Delta x \leq \ell$. Поскольку нельзя создать пучок света, ширина которого была бы меньше длины световой волны ($\Delta x > \lambda$), то $\lambda < \ell$, поэтому согласно (12.51)

$$\lambda < \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}.$$

Так как $\lambda = 2\pi c/\omega$, где ω – частота световых колебаний, c – скорость света, то

$$\hbar^2 \omega^2 > 32\pi^2 m c^2 (U_0 - E).$$

В нерелятивистской механике энергия должна быть меньше собственной энергии частицы mc^2 , поэтому

$$\hbar\omega > U_0 - E.$$

Таким образом, энергия световых квантов в пучке должна превосходить разность между высотой потенциального барьера и энергией частицы. Т.е. утверждение о местонахождении частицы внутри барьера имеет смысл, если ее можно осветить пучком с достаточно большой энергией, чтобы можно было локализовать частицу. И тогда никакого парадокса с энергией не возникает.

Последовательный квантово-механический анализ возможности обнаружения частицы внутри потенциального барьера с использованием электронного микроскопа в качестве измерительного прибора дан Леонтовичем и Мандельштамом [21], с. 390–393. На основе вычисления волновой функции показано, что изображение частицы на пластинке можно получить, если энергия «освещающих» электронов достаточно велика и удовлетворяет условию $E > U_0$. При этом $\Psi \neq 0$ внутри барьера.

Заметим, что явления, рассматриваемые в «барьерных» задачах, носят в принципе нестационарный характер и поэтому должны рассматриваться на основе нестационарной теории возмущений. Стационарная теория не дает реальной пространственно-временной картины движения частицы через потенциальный барьер и не позволяет ответить на такие вопросы, как длительность процесса туннелирования, или скорость прошедших и отраженных частиц. Такая задача в виду ее сложности не может быть решена аналитически, но допускает численное моделирование [8].

3. Некоторые приложения теории туннельного эффекта

а) Холодная эмиссия электронов из металла

Если к металлу приложить большое электрическое поле $\sim 10^6$ В/см, то даже при низких температурах электроны начинают покидать металл. Явление вырывания электронов с поверхности металла под действием внешнего электростатического поля получило название холодной или автоэлектронной эмиссии.

Этот эффект непонятен с точки зрения классической физики. Для вырывания электрона из металла необходимо сообщить ему энергию не меньшую, чем работа выхода. Однако постоянное электрическое поле в металл не проникает и не может изменить энергию электронов внутри металла. При низких температурах электроны в металле заполняют низшие энергетические уровни вплоть до максимального, называемого уровнем Ферми. Энергия электронов оказывается меньше высоты потенциального барьера и поэтому они не могут покинуть металл. Можно было бы предположить, что электрическое поле понижает высоту потенциального барьера, но в таком случае должен наблюдаться лавинообразный поток электронов через барьер и весьма большой ток эмиссии. На опыте же наблюдается постепенное нарастание тока с ростом поля.

С точки зрения квантовой механики холодная эмиссия есть проявление туннельного эффекта. При наличии электрического поля, приложенного к поверхности проводника, потенциальная энергия электрона имеет вид:

$$U(x) = U_0 - e\mathcal{E}x, \quad (12.53)$$

где e – заряд электрона, \mathcal{E} – напряженность поля. На рис. 51 потенциальная энергия (12.53) при наличии поля изображена пунктирной прямой, тангенс угла наклона которой к оси x равен $(-e\mathcal{E})$. Из этого рисунка видно, что приложенное поле уменьшает толщину потенциального барьера, делая ее конечной.

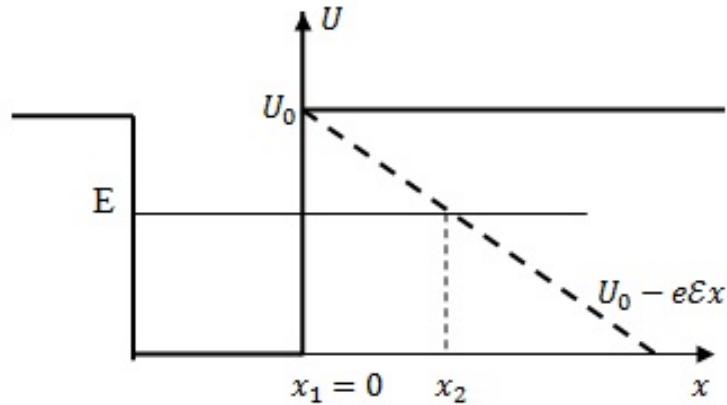


Рис. 51. Потенциальная энергия электрона в металле в отсутствии внешнего поля и при наличии поля

Благодаря туннельному эффекту электрон может преодолеть потенциальный барьер, коэффициент прозрачности которого определяется формулой

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\}. \quad (12.54)$$

Точка выхода из барьера x_2 определяется из условия $U_0 - e\mathcal{E}x_2 = E$, т.е.

$$x_2 = \frac{U_0 - E}{e\mathcal{E}}.$$

Согласно (12.54) задача сводится к вычислению интеграла

$$J = \int_0^{x_2} \sqrt{U_0 - e\mathcal{E}x - E} dx = \sqrt{e\mathcal{E}} \int_0^{x_2} \sqrt{x_2 - x} dx = \frac{2}{3} \sqrt{e\mathcal{E}} x_2^{3/2}.$$

Таким образом, имеем следующее выражение для коэффициента прозрачности:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar} \frac{(U_0 - E)^{3/2}}{e\mathcal{E}} \right\} = D_0 e^{-\frac{\varepsilon_0}{\mathcal{E}}}, \quad (12.55)$$

где D_0 и \mathcal{E}_0 – константы, зависящие от природы металла и энергии находящихся в нем свободных электронов. Ток холодной эмиссии пропорционален коэффициенту прозрачности, поэтому

$$j = j_0 D = j_0 e^{-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}}. \quad (12.56)$$

Такая зависимость тока от поля хорошо подтверждается экспериментально.

б) Альфа-распад тяжелых ядер.

Опыт показывает, что многие тяжелые ядра самопроизвольно испускают α -частицы (т.е. ядра гелия с зарядом $+2e$ и массой, приблизительно равной четырем массам протона). График потенциальной энергии α -частицы в зависимости от расстояния до центра ядра приведен на рис. 52. На малых расстояниях, в пределах радиуса ядра ($R \sim 10^{-13}$ см) действуют мощные ядерные силы притяжения. Внутри этой области α -частица «заперта» в глубокой потенциальной яме. Вне ядра α -частица находится под воздействием силы кулоновского отталкивания от положительно заряженного дочернего ядра (испустившего α -частицу). В этой области потенциальная энергия является положительной и возрастает обратно пропорционально расстоянию от ядра. Таким образом, вблизи границы ядра имеется кулоновский потенциальный барьер.

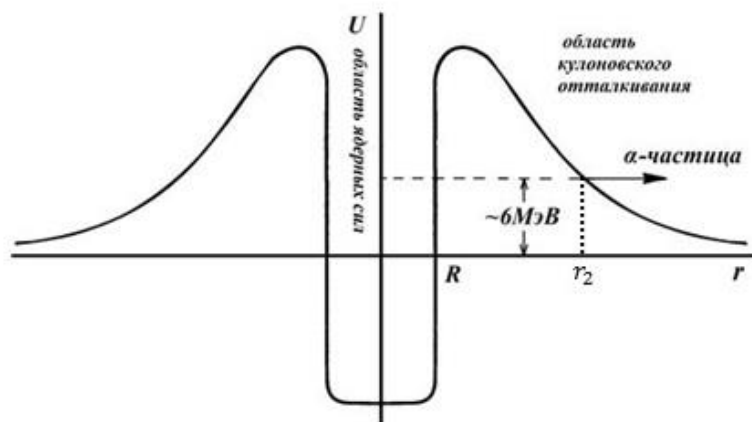


Рис. 52. Потенциальная энергия α -частицы в поле атомного ядра

Потенциальная энергия α -частицы определяется следующим выражением:

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & \text{при } r < R, \\ \frac{2(Z-2)e^2}{r} & \text{при } r > R. \end{cases} \quad (12.57)$$

Экспериментально установлено, что энергия α -частиц, вылетающих из ядра, меньше высоты потенциального барьера. Например, для ядра урана, потенциальный барьер имеет высоту порядка 30 МэВ, а энергия вылетающих α -частиц не превышает 10 МэВ. Объяснение этого явления было дано на основе квантовой механики. Теория α -распада была построена в 1928 г. Г. Гамовым, Э. Кондоном и Р. Герни. Они показали, что α -распад представляет собой туннельный эффект.

Если α -частица движется со скоростью v в пределах атомного ядра радиусом R , то она будет испытывать каждую секунду в среднем v/R столкновений со стенкой ядра, т.е. частота столкновений

$$\nu_{ст} = v/R. \quad (12.58)$$

Согласно неравенству Гейзенберга

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Полагая $\Delta x \sim R$, $\Delta p_x \sim mv$, получаем, что

$$v \sim \frac{\hbar}{2mR}$$

и согласно (12.58)

$$\nu_{ст} = \frac{\hbar}{2mR^2}. \quad (12.59)$$

Постоянная радиоактивного распада

$$\lambda = \nu_{ст} \cdot D, \quad (12.60)$$

где D – коэффициент прохождения через потенциальный барьер. Для его вычисления воспользуемся формулой, аналогичной (12.48):

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_R^{r_2} \sqrt{2m[U(r) - E]} dr \right\}. \quad (12.61)$$

Мы видим, что задача сводится к искусству вычисления следующего интеграла:

$$J = \int_R^{r_2} \sqrt{\frac{2(Z-2)e^2}{r} - E} dr. \quad (12.62)$$

Пределы интегрирования соответствуют точкам поворота, в которых $E = U$.

В точке r_2

$$E = \frac{2(Z-2)e^2}{r_2}, \quad (12.63)$$

поэтому $2(Z-2)e^2 = Er_2$. При этом интеграл (12.62) запишется в виде

$$J = \int_R^{r_2} \sqrt{\frac{Er_2}{r} - E} dr = \sqrt{E} \int_R^{r_2} \sqrt{\frac{r_2}{r} - 1} dr. \quad (12.64)$$

Для вычисления (12.64) произведем замену переменной:

$$\frac{r_2}{r} = \frac{1}{x^2},$$

тогда $r = r_2 \cdot x^2$, $dr = 2r_2 x dx$. Соответственно появятся и новые пределы интегрирования:

$$x_1^2 = R/r_2 \approx 0, \quad x_2^2 = r_2/r_2 = 1.$$

Тогда интеграл (12.63) будет иметь вид

$$J = 2r_2 \sqrt{E} \int_0^1 \sqrt{\frac{1}{x^2} - 1} x dx = 2r_2 \sqrt{E} \int_0^1 \sqrt{1 - x^2} dx = 2r_2 \sqrt{E} \pi/4.$$

Учитывая, что согласно (12.63)

$$r_2 = \frac{2(Z-2)e^2}{E},$$

получаем

$$J = \frac{(Z-2)e^2 \pi}{\sqrt{E}}.$$

Подставляя это выражение в (12.61), находим коэффициент прозрачности потенциального барьера

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} \frac{\pi(Z-2)e^2}{\sqrt{E}} \right\}. \quad (12.65)$$

Из (12.65) и (12.60) следует, что

$$\lambda = \frac{\hbar}{2mR^2} D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} \frac{\pi(Z-2)e^2}{\sqrt{E}} \right\}.$$

Поэтому

$$\ln \lambda = \ln \left(\frac{\hbar D_0}{2mR^2} \right) - \frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} \frac{\pi(Z-2)e^2}{\sqrt{E}},$$

т.е.

$$\ln \lambda = A - \frac{B}{\sqrt{E}}. \quad (12.66)$$

Формула (12.66) совпадает с законом Гейгера-Нэттола, экспериментально установленным в 1911–1912 гг., что свидетельствует о разумности объяснения альфа-распада с помощью туннельного эффекта.

Имеются и другие многочисленные проявления туннельного эффекта. В частности, возникновение контактной разности потенциалов, обусловленной разностью работ выхода электронов из металлов, приведенных в контакт. Туннельный эффект лежит в основе сканирующей электронной микроскопии (прошло более полувека от построения теории туннельного эффекта до создания первого сканирующего туннельного микроскопа в 1981 г.). Благодаря процессу туннелирования имеет место эффект Джозефсона в сверхпроводниках (Приложение II). Туннельный эффект используется при записи информации на флеш-накопители. Квантовое туннелирование между различными пространственными ориентациями демонстрирует молекула воды в условиях конфинмента, например, в нанометровых каналах кристалла берилла $\text{Al}_2[\text{Be}_3(\text{Si}_6\text{O}_{18})]$. Важную роль туннельный эффект играет в биологических процессах, в частности, он лежит в основе переноса электронов в процессе фотосинтеза и в дыхательной цепи. Наконец, туннельный эффект «несет ответственность» за процесс спонтанного деления атомных ядер и термоядерный синтез, являющийся источником энергии Солнца и других звезд.

Кулоновское отталкивание ядер изотопов водорода препятствует их сближению, создавая потенциальный барьер. Для его преодоления необходимы высокие температуры, определяемые условием

$$\frac{e^2}{r} \sim 3 kT .$$

Учитывая, что ядерные силы начинают проявлять себя уже на расстояниях $r \sim 10^{-11}$ см, получим

$$T \sim \frac{e^2}{3kr} \sim \frac{(4,8 \cdot 10^{-10})^2}{3 \cdot 1,38 \cdot 10^{-16} \cdot 10^{-11}} \sim 10^8 K.$$

Однако температура в недрах Солнца составляет десятки миллионов градусов, т.е. на порядок ниже и, казалось бы, термоядерный синтез невозможен. Но благодаря туннельному эффекту реакции слияния ядер могут происходить при более низких температурах и поэтому звезды светят.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

История физики помнит тот день, когда ещё совсем юный Макс Планк пришёл к 70-летнему профессору Филиппу Жолли и сказал о своих намерениях заняться теоретической физикой. Маститый учёный ответил ему так: «Молодой человек, зачем Вы хотите испортить себе жизнь? Теоретическая физика уже давно закончена, вряд ли стоит браться за такое бесперспективное дело». Однако вопреки опрометчивому предсказанию профессора, именно Планку было суждено в 1900 г. произнести слово «квант» и открыть новую эру в развитии физики.

А. Эйнштейн в статьях «Мотивы научного исследования» (1918 г.) и «Пролог» (1932 г.) пишет [37]: «Много разных людей посвящало себя науке, но не все посвящали себя науке ради самой науки. Некоторые входили в ее храм потому, что это давало им возможность проявить свое дарование. Для этой категории людей наука является своего рода спортом, занятие которым доставляет им радость подобно тому, как атлету доставляют удовольствие упражнения, развивающие силу и ловкость. Существует другая категория людей, вступающих в храм науки с тем, чтобы предоставить в ее распоряжение свой мозг, получить за это приличное вознаграждение. Такие люди становятся учеными лишь случайно, в силу обстоятельств, обусловивших выбор их жизненного пути. Если бы обстоятельства, сопутствовавшие этому выбору, были иными, эти люди могли бы стать политическими деятелями или крупными дельцами. Ясно, что если бы люди, посвятившие себя науке, относились только к этим двум категориям, то ее здание никогда бы не выросло до тех величественных размеров, которых оно достигло в настоящее время, точно так же, как не смог бы подняться лес, состоящий из одних лишь ползучих растений. Если бы посланный богом ангел пришел в храм и изгнал из него тех, кто принадлежит к этим двум категориям, то храм катастрофически опустел бы. Но все же несколько жрецов остались бы в храме – кое-кто от прошлых времен, а кое-кто и от нашего времени. Среди последних был бы и наш Планк, и за это мы его так любим».

«...Обратимся к тем, кто снискал расположение ангела. Большинство из них – люди странные, замкнутые, уединённые; несмотря на общие черты они в действительности сильнее разнятся друг от друга, чем изгнанные. Что привело их в храм?.. Я прежде всего думаю, что одно из наиболее сильных побуждений, ведущих к искусству или науке, – это желание уйти от будничной жизни с её мучительной жестокостью и безутешной пустотой, уйти от уз вечно меняющихся собственных причудей. Эта причина толкает людей с тонкими душевными струнами от личных переживаний в мир объективного видения и понимания. Эту причину можно сравнить с тоской, неотразимо влекущей горожанина из шумной и мутной окружающей среды к тихим высокогорным ландшафтам, где взгляд далеко проникает сквозь неподвижный чистый воздух и наслаждается спокойными очертаниями, которые кажутся предназначенными для вечности.

Но к этой негативной причине добавляется и позитивная. Человек стремится каким-то адекватным способом создать в себе простую и ясную картину мира для того, чтобы оторваться от мира ощущений, чтобы в известной степени попытаться заменить этот мир созданной таким образом картиной... В созданную им картину мира человек помещает центр тяжести своей души и таким образом находит в ней тот покой и равновесие, которые не может найти в тесном кругу повседневной жизни, требующем от него непрерывных реакций».

Именно стремление к восприятию «изначальной гармонии было неиссякаемым источником терпения и настойчивости, с которой Планк отдавался самым простым вопросам, связанным с физической наукой, в то время как он мог бы поддаться искушению и пойти иными путями, которые привели бы к более привлекательным результатам».

«Величие Планка не нуждается в жалком подтверждении с моей стороны. Его труд дал один из самых мощных толчков прогрессу науки. Его идеи будут жить и работать до тех пор, пока существует физическая наука».

Всё произошедшее далее после фундаментальной работы Планка можно охарактеризовать словами Эйнштейна: «Это драма, драма идей». Становление и развитие квантовой теории – это интереснейшая история формирования новых

понятий и представлений, породивших бурные философские дискуссии. Причём создание нового математического аппарата предшествовало физическому пониманию микромира.

Наиболее драматичным событием, по мнению де Бройля, оказалось открытие двойственной корпускулярно-волновой природы всех микрообъектов. Следующим потрясением для физиков явился вероятностный мир, где классической причинности уже нет места. В этом мире, построенном на вероятности, электрон описывается волновой функцией Ψ , квадрат модуля которой $|\Psi|^2$ определяет вероятность нахождения электрона в том или ином месте. Чему равна эта вероятность, и как она меняется со временем, – на этот вопрос отвечает основное уравнение нерелятивистской квантовой механики – уравнение Шрёдингера. Электрон может находиться в любом месте, где $|\Psi|^2 \neq 0$, т.е его описание становится неопределённым, подчиняющимся принципу неопределённости Гейзенберга. Отсюда с неизбежностью возникает «мир утраченных траекторий» и новое представление об атоме.

В 1913 г. Н. Бор, спасая «обречённый» атом, устойчивость которого противоречила классической электродинамике Максвелла, построил первую квантовую теорию атома, в которой классическое поведение электрона было «подправлено» двумя квантовыми постулатами и правилом квантования круговых орбит. Первый «квантовый портрет» атома обладал достаточной наглядностью, он напоминал Солнечную систему, где планеты движутся с определенной скоростью и по определенным орбитам. Причем, эти характеристики движения могут быть определены одновременно, в один и тот же момент времени. Но согласно соотношению неопределённости Гейзенберга у электрона, движущегося в атоме с определённой скоростью, никакой определённой орбиты не существует!

Как же изменился «квантовый портрет» атома спустя 13 лет с появлением волновой механики Шрёдингера и с принятием статистической интерпретации Ψ -функции? Сколько квантовых чисел необходимо для описания электрона в атоме, и почему в атоме нельзя найти двух электронов-«близнецов» с одинаковым набором квантовых чисел? Почему пришлось ввести представление

о спине электрона? Как влияет симметрия волновой функции на свойства системы тождественных частиц? Как квантовая механика объясняет строение Периодической системы химических элементов Д.И. Менделеева? Как магнитное поле перестраивает лестницу энергетических уровней в атоме, обеспечивая наблюдаемое богатство спектральных линий? Каким способом можно описать малые возмущения квантовой системы, возникающие во внешних электрических и магнитных полях? Как А. Эйнштейну удалось заложить «первый камень» в фундамент квантовой электроники, обеспечив спустя четыре десятилетия рождение лазеров и мазеров? Как можно осуществить эффект «замораживания» физических процессов в условиях непрерывных наблюдений за квантовой системой (эффект «сторожевой собаки»)?

Ответы на эти и ряд других вопросов содержатся во второй части нашего курса лекций.

ПРИЛОЖЕНИЯ

ПРИЛОЖЕНИЕ I. Волновой пакет

Как было отмечено в лекции 4, согласно гипотезе де Бройля со свободной частицей, движущейся вдоль направления ОХ, связана плоская монохроматическая волна

$$\Psi = A e^{i(kx - \omega t)}. \quad (I.1)$$

Рассмотрим волновой пакет, локализованный в окрестности точки k_0 , представляющий собой суперпозицию волн (I.1), мало отличающихся друг от друга по длине волны и направлению распространения (рис. 22, лекция 4)

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} C(k) e^{i(kx - \omega t)} dk, \quad (I.2)$$

где амплитуда $C(k)$ есть медленно меняющаяся функция волнового числа k , т.е. $C(k) = C(k_0)$. Вблизи точки k_0 волновое число можно представить в виде

$$k = k_0 + (k - k_0) = k_0 + \Delta k,$$

поэтому частота ω как функция k запишется следующим образом

$$\omega(k) = \omega\{k_0 + (k - k_0)\} = \omega(k_0 + \Delta k), \quad (I.3)$$

где k_0 – волновое число, соответствующее центру группы волн. Разлагая частоту ω в ряд Тейлора по степеням $(k - k_0)$, получим

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 + \dots, \quad (I.4)$$

или

$$\omega(k) = \omega_0 + \omega_1 + \omega_2 + \dots, \quad (I.5)$$

где

$$\omega_0 = \omega(k_0), \omega_1 = \frac{\partial \omega}{\partial k} \Big|_{k_0} (k - k_0), \omega_2 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2} \Big|_{k_0} (k - k_0)^2.$$

Ограничимся пока учётом первых двух членов в разложении $\omega(k)$, тогда (1.2) примет вид

$$\Psi(x, t) = C(k_0) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{i\left(x - \frac{\partial \omega}{\partial k} t\right) \Delta k} dk. \quad (1.6)$$

Вводя новую переменную интегрирования $\gamma = k - k_0$, получим

$$\Psi(x, t) = C(k_0) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} e^{i\left(x - \frac{\partial \omega}{\partial k} t\right) \gamma} d\gamma. \quad (1.7)$$

Это выражение можно представить в виде

$$\Psi(x, t) = C(x, t) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}, \quad (1.8)$$

если ввести новую амплитуду

$$C(x, t) = C(k_0) \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} e^{i\left(x - \frac{\partial \omega}{\partial k} t\right) \gamma} d\gamma. \quad (1.9)$$

Выполняя интегрирование (1.9), будем иметь

$$C(x, t) = C(k_0) \frac{e^{i\left(x - \frac{\partial \omega}{\partial k} t\right) \Delta k} - e^{-i\left(x - \frac{\partial \omega}{\partial k} t\right) \Delta k}}{i\left(x - \frac{\partial \omega}{\partial k} t\right)}. \quad (1.10)$$

Умножив и разделив правую часть этого выражения на $2\Delta k$, получим

$$C(x, t) = 2\Delta k C(k_0) \frac{\sin \xi}{\xi},$$

где

$$\xi = \left(x - \frac{\partial \omega}{\partial k} t\right) \Delta k. \quad (1.11)$$

Вводя обозначение $A = 2\Delta k C(k_0)$, получим для амплитуды волнового пакета следующее выражение

$$C(x, t) = A \frac{\sin \xi}{\xi}. \quad (I.12)$$

График функции (I.12) представлен на рис. 53.

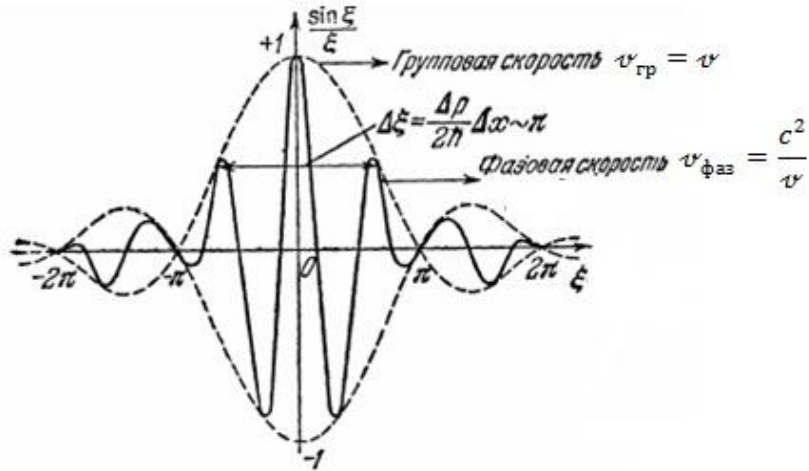


Рис. 53. Волновой пакет при $t = 0$

Выясним физический смысл каждого из членов в разложении $\omega(k)$, представленного формулой (I.5). Согласно (4.10) скорость распространения постоянной фазы (фазовая скорость) определяется выражением

$$v_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k},$$

поэтому первый член ω_0 в формуле (I.5) определяет фазовую скорость волны (I.1).

В случае микрочастицы с массой m

$$v_{\text{фаз}} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v}. \quad (I.13)$$

Для фотона ($m_0 = 0, E = cp$) фазовая скорость $v_{\text{фаз}} = c$.

Из рис. 53 видно, что центр группы волн (координата, где амплитуда $C(x, t)$ имеет максимум) находится в начале координат: $\xi = 0$. Согласно (I.11)

$$\left(x - \frac{\partial \omega}{\partial k} t\right) \Delta k = 0.$$

Отсюда следует, что

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = v_{\text{гр}}.$$

Поэтому следующий член ω_1 в формуле (1.5), содержащий производную $\frac{\partial \omega}{\partial k}$, определяет групповую скорость волнового пакета (формула 4.16):

$$v_{\text{гр}} = \frac{\partial \omega}{\partial k}.$$

С этой скоростью перемещается центр группы волн. Согласно (4.17) для электрона групповая скорость совпадает с его механической скоростью $v_{\text{гр}} = v$. Для фотона $v_{\text{гр}} = c$, т.е. совпадает с фазовой скоростью.

Из рис. 53 следует, что ширина центрального максимума $\Delta \xi = 2\pi$, а с учётом других точек пространства $\Delta \xi \geq 2\pi$. Согласно (1.11)

$$\left(x - \frac{\partial \omega}{\partial k} t\right) \Delta k \geq 2\pi,$$

то есть

$$\Delta x \Delta k \geq 2\pi. \quad (1.14)$$

Эта формула представляет собой соотношение неопределённостей для координаты x и волнового числа k .

С помощью группы волн можно образовать волновой пакет с размерами порядка радиуса частицы (например, электрона). Однако такая частица будет неустойчивой. Это обусловлено дисперсией фазовых скоростей волн, образующих пакет. В результате волновой пакет с течением времени расплывается и не сохраняет свою форму. Время расплывания можно определить с помощью временно отброшенной в (1.2) части фазы (содержащей ω_2), которая за промежуток времени τ станет соизмеримой с π :

$$\omega_2 \tau \sim \pi, \quad (1.15)$$

то есть

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2} \Big|_{k_0} (k - k_0)^2 \tau \sim \pi. \quad (1.16)$$

Учитывая, что

$$\frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2} = \frac{h}{2\pi} \frac{\partial^2 E}{\partial p^2} = \frac{h}{2\pi m},$$

$$\Delta k \sim \frac{2\pi}{\Delta x},$$

из (I.16) получаем следующее выражение для времени расплывания волнового пакета

$$\tau \sim \frac{m(\Delta x)^2}{h}. \quad (\text{I.17})$$

Из (I.17) видно, что время расплывания волнового пакета определяется массой частицы m и областью её локализации Δx .

Таким образом, третий член в разложении $\omega(k)$ связан с временем расплывания волнового пакета. Оценим это время в двух случаях.

1) Для фотона $m_0 = 0$, $E = cp$, $\frac{\partial^2 E}{\partial p^2} = 0$, поэтому $\tau \rightarrow \infty$, т.е. волновой пакет останется стабильным. Это объясняется тем, что в данном случае фазовые скорости всех компонент волнового пакета не зависят от волновых чисел и остаются неизменными ($v_{\text{фаз}} = c$).

2) В случае электрона $m \sim 10^{-27}$ г и $\Delta x \sim 10^{-13}$ см, поэтому за время $\tau \sim 10^{-16}$ с, т.е. практически мгновенно, волновой пакет расплывётся. Электрон нельзя будет рассматривать как устойчивое образование, что противоречит экспериментальным фактам.

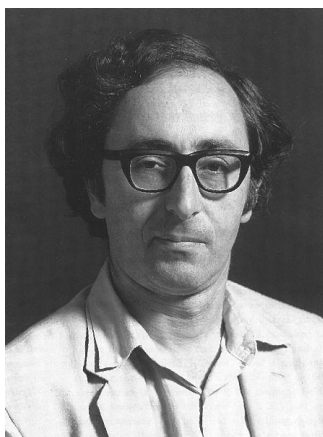
В заключение заметим, что из (I.13) и (4.17) следует универсальное соотношение между фазовой и групповой скоростями волн де Бройля:

$$v_{\text{фаз}} \cdot v_{\text{гр}} = c^2.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ II. Эффект Джозефсона

В 1962 г. Брайан Джозефсон, двадцатидвухлетний аспирант Кембриджского университета, теоретически предсказал явление, получившее название «эффект Джозефсона». Различают два эффекта: стационарный и нестационарный эффект Джозефсона.

Стационарный эффект заключается в возможности протекания электрического тока между двумя сверхпроводниками, разделенными тонкой прослойкой изолятора толщиной всего в несколько атомов, при отсутствии приложенного к ним напряжения (рис. 54). В основе этого эффекта лежит квантовое туннелирование электронных куперовских пар.



Брайан Джозефсон

Пару Купера образуют электроны с равными по величине и противоположными по направлению импульсами и спинами. Как показал Леон Купер в 1956 г., сверхпроводимость в металлах связана с образованием таких электронных пар с нулевым суммарным импульсом. Движение пар является строго согласованным (коррелированным): центры масс всех пар движутся с одним и тем же импульсом $\vec{p} = m\vec{v}$, следовательно, все куперовские пары имеют одну и ту же длину волны де Бройля $\lambda = h/p$.

Их состояние характеризуется единой волновой функцией и одной и той же фазой, т.е. имеет место фазовая когерентность куперовских пар. В этом выражается дальний порядок сверхпроводника.

Согласно (5.28)

$$\vec{j}_w = w \frac{\hbar}{m} \text{grad} \varphi$$

поток вероятности возникает при наличии разности фаз. Установим зависимость \vec{j}_{w} от разности $(\varphi_1 - \varphi_2)$, где φ_1 и φ_2 – фазы, относящиеся к электронам первого и второго сверхпроводников.

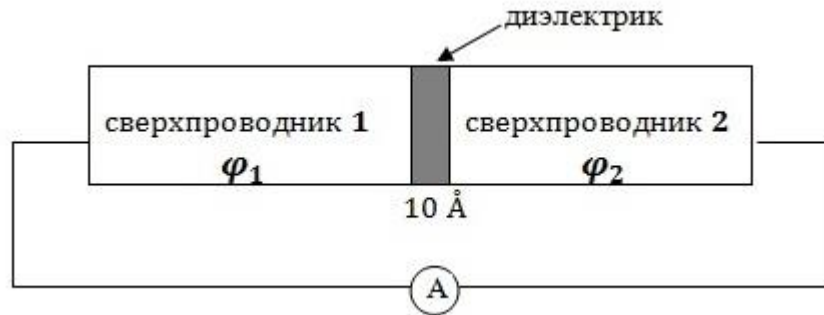


Рис. 54. Стационарный эффект Джозефсона

Запишем волновую функцию электронов для каждого сверхпроводника:

$$\begin{aligned}\Psi_1 &= A_1 e^{i\varphi_1}, \\ \Psi_2 &= A_2 e^{i\varphi_2}.\end{aligned}$$

Согласно принципу суперпозиции состояний

$$\Psi = A_1 e^{i\varphi_1} + A_2 e^{i\varphi_2}. \quad (\text{II. 1})$$

Подставим эту волновую функцию в выражение для плотности тока вероятности (5.22)

$$\vec{j}_w = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi),$$

и будем рассматривать далее проекцию на ось X:

$$j_{w,x} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right). \quad (\text{II. 2})$$

Подставляя (II. 1) в (II. 2), получим

$$\begin{aligned}j_{w,x} &= \frac{i\hbar}{2m} \left[(A_1 e^{i\varphi_1} + A_2 e^{i\varphi_2}) \frac{\partial}{\partial x} (A_1 e^{-i\varphi_1} + A_2 e^{-i\varphi_2}) \right. \\ &\quad \left. - (A_1 e^{-i\varphi_1} + A_2 e^{-i\varphi_2}) \frac{\partial}{\partial x} (A_1 e^{i\varphi_1} + A_2 e^{i\varphi_2}) \right].\end{aligned}$$

Полагая, что φ_1 и φ_2 являются постоянными, а амплитуды A_1 и A_2 – вещественными, приходим к следующему выражению:

$$j_{w,x} = \frac{\hbar}{m} \left(A_2 \frac{\partial A_1}{\partial x} - A_1 \frac{\partial A_2}{\partial x} \right) \sin(\varphi_1 - \varphi_2). \quad (\text{II. 3})$$

Здесь

$$j_0 = \frac{\hbar}{m} \left(A_2 \frac{\partial A_1}{\partial x} - A_1 \frac{\partial A_2}{\partial x} \right)$$

есть максимальный ток через туннельный контакт, таким образом, приходим к формуле Джозефсона

$$\boxed{j_{w,x} = j_0 \sin(\varphi_1 - \varphi_2)}. \quad (\text{II. 4})$$

Средняя плотность электрического тока определяется выражением

$$\vec{j}_e = \frac{ie\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi). \quad (\text{II. 5})$$

Итак, при нулевой разности потенциалов через туннельный контакт, образованный двумя сверхпроводниками, разделенными тонким слоем диэлектрика, может протекать постоянный электрический ток, который возникает за счет разности фаз. Стационарный эффект Джозефсона был обнаружен экспериментально спустя год после теоретического предсказания Джозефсона, в 1963 г., Андерсоном и Роуэлом.

Джозефсон предсказал также и нестационарный эффект: если к туннельному контакту приложить постоянную разность потенциалов, то возникает высокочастотный переменный ток (рис. 55).

Определим частоту переменного джозефсоновского тока. Волновую функцию электронов для каждого из сверхпроводников представим в виде:

$$\Psi = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} E t} = \Psi_0 e^{i\varphi}, \quad (\text{II. 6})$$

где Ψ_0 – часть волновой функции, не зависящая от времени. Учитывая, что

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} E \Psi \right) = E \Psi = -\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} \Psi,$$

получим

$$\begin{aligned} -\hbar \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} &= E_1, \\ -\hbar \frac{\partial \varphi_2}{\partial t} &= E_2. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$E_1 - E_2 = \hbar \left(\frac{\partial \varphi_2}{\partial t} - \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} \right) = \hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Delta \varphi). \quad (\text{II. 7})$$

Если разность потенциалов между двумя сверхпроводниками отлична от нуля ($V \neq 0$), то при переходе заряда q от первого сверхпроводника ко второму энергия изменяется на величину $\Delta E = qV$. Согласно микроскопической теории сверхпроводимости Бардина–Купера–Шриффера (1957 г.) $q = 2e$ (заряд электронной куперовской пары). Таким образом,

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Delta \varphi) = 2eV.$$

После интегрирования этого выражения получаем

$$\Delta \varphi = \Delta \varphi_0 + \frac{2eV}{\hbar} t. \quad (\text{II. 8})$$

Подставляя (II. 8) в (II.4), будем иметь следующее выражение для плотности тока вероятности

$$j_{w,x} = j_0 \sin \left(\Delta \varphi_0 + \frac{2eV}{\hbar} t \right). \quad (\text{II. 9})$$

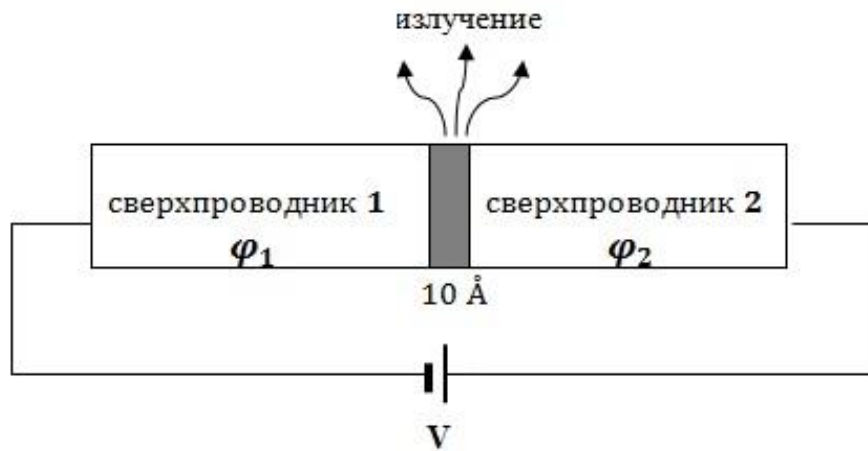


Рис. 55. Нестационарный эффект Джозефсона

Из (II.9) видно, что постоянная разность потенциалов должна приводить к осцилляциям тока через контакт с частотой

$$\Omega = \frac{2eV}{\hbar}, \quad (\text{II. 10})$$

т.е. должно возникать излучение, генерируемое парами Купера при переходе через туннельный контакт. Такое излучение на частоте 10 000 МГц (с длиной волны 3 см) зарегистрировали в 1964 г. И.М. Дмитренко, В.М. Свистунов, И.К. Янсон в Харьковском физико-техническом институте. Мощность излучения составляла 10^{-14} Вт. Спустя полгода аналогичный результат был получен американскими физиками из Пенсильванского университета.

За свое открытие Джозефсон был удостоен Нобелевской премии по физике в 1973 г. Открытие эффекта Джозефсона имело очень большое значение. Впервые была установлена взаимосвязь макроскопической величины (электрического тока) и микроскопической характеристики – фазы волновой функции, считавшейся ненаблюдаемой. Кроме того, как следует из формулы (II. 10), хорошо измеряемые макроскопические величины, такие как частота и напряжение, связаны линейно через отношение фундаментальных констант – заряда электрона и постоянной Планка. Поэтому одним из первых практических применений эффекта Джозефсона было измерение с недоступной ранее точностью отношения e/\hbar .

С помощью эффекта Джозефсона еще в 1970-е гг. был установлен новый, более точный эталон вольта.

Джозефсоновские туннельные контакты широко используются в качестве детекторов электромагнитного излучения. Такое применение их основано на явлении резонанса между внешними электромагнитными колебаниями и собственными колебаниями, возникающими в туннельном контакте при включении постоянного напряжения. Высокочувствительные приемники электромагнитного излучения на основе эффекта Джозефсона используются для исследования излучения Вселенной.

Стационарный эффект Джозефсона нашел применение в сверхчувствительных квантовых магнитометрах – СКВИДах. Слово «СКВИД» составлено из первых букв английского названия SQUID — Superconducting QUantum Interference Device (сверхпроводящее квантовое интерференционное устройство). Простейший СКВИД представляет собой сверхпроводящее кольцо с двумя джозефсоновскими контактами (рис. 56).

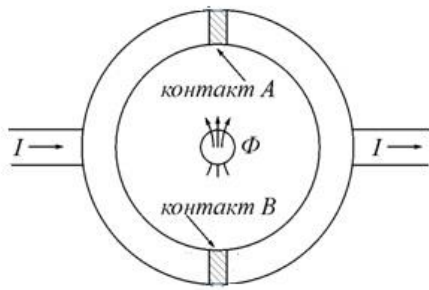


Рис. 56. СКВИД с двумя джозефсоновскими туннельными контактами

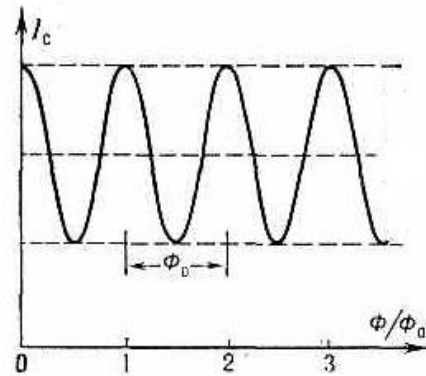


Рис. 57. Зависимость критического тока СКВИДа от внешнего магнитного поля

Это устройство является аналогом известного в оптике явления интерференции света от двух щелей, только здесь интерферируют не световые волны, а два джозефсоновских тока. В СКВИДе волна электронов разделяется на две, каждая из которых проходит свой туннельный контакт, а затем обе волны сходятся вместе. В отсутствии внешнего магнитного поля обе волны придут без разности фаз. Но при наличии магнитного поля в контуре будет наводиться циркулирующий сверхпроводящий ток. Этот ток в одном из контактов будет вычитаться из постоянного внешнего тока, а во втором — складываться с ним. Теперь две ветви будут иметь разные токи, и между туннельными контактами возникнет разность фаз. Волны электронов, пройдя через контакты и соединившись, будут интерферировать, интерференция проявится как зависимость критического тока СКВИДА от приложенного внешнего магнитного поля (рис. 57). Таким образом, разность фаз ($\varphi_A - \varphi_B$) можно регулировать потоком напряженности внешнего магнитного поля. Осциллирующий критический ток достигает максимума, когда пронизывающий контур магнитный поток Φ равен целому числу квантов Φ_0 .

Сверхчувствительные магнитометры позволяют измерять индукцию магнитного поля с точностью до 10^{-15} Тл. Этим обусловлено их широкое применение в медицине (магнитокардиография, магнитоэнцефалография), геофизике, биохимии. Перспективным направлением является применение СКВИДов в квантовых компьютерах в качестве кубитов.

ПРИЛОЖЕНИЕ III. Запутанные квантовые состояния

Наряду с суперпозиционными состояниями, рассмотренными в лекции 6, фундаментальное значение имеют запутанные квантовые состояния. В истории их изучения можно выделить четыре важнейшие даты: 1935, 1964, 1993, 1997 гг.

Истоки исследований квантовой запутанности восходят к статье А. Эйнштейна, Б. Подольского и Н. Розена (ЭПР) 1935 г. «Можно ли считать квантово-механическое описание физической реальности полным?». Хотя эта работа преследовала несколько иную цель – доказать неполноту квантовой механики, основанной на копенгагенской интерпретации (в основе которой лежат вероятностная трактовка волновой функции, постулат редукции, соотношение неопределённостей Гейзенберга и принцип дополнительности), именно в ней была предпринята первая попытка проанализировать свойства запутанных состояний.

Признавая безусловные успехи квантовой механики, Эйнштейн тем не менее считал, что квантово-механическое описание физических систем не является полным, что оно должно быть дополнено скрытыми параметрами, лежащими вне квантовой теории. Авторами статьи был рассмотрен мысленный эксперимент (получивший название «парадокс ЭПР»), который заключался в измерении параметров микрообъекта косвенным образом, не оказывая на этот объект непосредственного воздействия. По мнению ЭПР, таким путём можно извлечь больше информации о состоянии микрообъекта, чем даёт квантово-механическое описание его состояния.

В статье ЭПР было рассмотрено невозмущающее измерение импульса. Покоящаяся частица самопроизвольно распадается на две частицы, которые разлетаются в противоположные стороны. По закону сохранения импульса суммарный импульс двух частиц равен нулю, а импульсы каждой из них равны по модулю и противоположны по направлению. Если в результате измерения определён импульс одной частицы, то сразу, мгновенно, становится известным импульс

другой, без всякого измерения (без внесения в её движение каких-либо возмущений). Измерив координату второй частицы, можно получить для неё значения двух неизмеримых одновременно величин, что противоречит соотношению неопределённостей Гейзенберга для координаты и импульса. Кроме того, возможность мгновенного влияния измерения состояния одной частицы на состояние другой, даже если она находится очень далеко от первой частицы, приводит к кажущемуся противоречию со специальной теорией относительности, где скорость распространения сигнала не превышает скорость света. Подобную корреляцию частиц Эйнштейн называл «призрачным действием на расстоянии».

Бор показал несостоятельность рассуждений Эйнштейна–Подольского–Розена. По мнению Бора, парадокс ЭПР возник как результат предположения о локальном характере взаимодействий в квантовых системах. Локальность, или близкодействие, – это свойство, характерное для законов классической физики, означающее, что количественные соотношения, выражающие закон, относятся к одной и той же пространственно-временной точке.

Разумеется, подсистемы, находящиеся на расстоянии, не связаны никаким физическим взаимодействием. Но благодаря свойству нелокальности (действия на расстоянии) квантовой механики оказывается возможным существование корреляций между состояниями запутанных подсистем исходной системы, как бы далеко друг от друга они ни находились. Отсюда вытекает возможность мгновенного определения квантового состояния в данном месте путём измерения запутанного с ним состояния в другом месте и его передача с бесконечной скоростью.

Разлетевшиеся частицы не могут рассматриваться как два независимых квантовых объекта, они составляют единую квантовую систему, применительно к которой только и можно проводить измерения. Обе частицы оказываются сцепленными, находящимися в коррелированном состоянии, которое описывается с помощью одной волновой функции. В момент измерения состояния одной частицы происходит изменение общей волновой функции системы частиц как квантового объекта, состоящего из двух подсистем.

Таким образом, запутанные состояния (entangled states) могут возникать в системе частиц, которые могут находиться в разных местах, на сколь угодно большом расстоянии друг от друга, но при этом ведут себя как единый квантовый объект. В этом коррелированном состоянии частиц, или ЭПР-состоянии, их свойства связаны, не будучи заданными точно. Условная вероятность для одной из них зависит от того, какое состояние второй частицы мы выбираем. При изменении условий выбора предсказание изменяется скачком.

Н. Бор предложил использовать спин для исследования квантовых корреляций в опыте типа ЭПР. Предположим, что частица с полным спином, равным нулю, распадается на две частицы со спинами по $\frac{1}{2}$ у каждой. Разлетающиеся в разные стороны частицы образуют единую квантовую систему с полным спином, равным нулю. Состояние двух частиц после распада имеет вид суперпозиции двух состояний: первая частица со спином вверх, вторая – со спином вниз и, наоборот, первая со спином вниз, вторая со спином вверх

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2). \quad (\text{III.1})$$

Множитель $\frac{1}{\sqrt{2}}$ учитывает, что полная вероятность равна 1, а каждое состояние имеет вероятность $1/2$, минус соответствует суммарному спину, равному нулю. Состояние (III.1) является запутанным состоянием двух частиц, причём направление спина каждой из них не определено, но между направлениями их спинов имеется квантовая корреляция.

Это согласованное направление спинов сохраняется даже тогда, когда частицы удаляются друг от друга на расстояние многих световых лет. Если при измерении проекции спина первой частицы обнаружится, что её спин направлен вверх, то мы сразу поймём, что проекция спина второй частицы направлена вниз.

Однако в этом согласованном поведении спинов пока ещё нет ничего специфически квантового. Согласованность между результатами измерений можно наблюдать и в обычном, макроскопическом, мире. Например, один человек имел необычную привычку каждый день надевать на одну ногу синий носок, а на другую – зелёный, в случайном порядке. Если видели на левой ноге у него синий носок, то сразу становилось ясно, что на правой ноге – носок зелёного цвета.

Квантовая специфика проявляется при измерении проекции спинов частиц не на одну, а на различные оси. Например, измеряется проекция спина первой частицы на ось z и проекция спина второй частицы на ось, наклонённую к оси z . Если в первом случае спин направлен вверх, то результат второго измерения точно предсказать нельзя; можно предсказать только вероятности двух альтернативных результатов измерения – в соответствии с правилами квантовой механики.

На первый взгляд кажется, что в ЭПР-экспериментах нарушается причинность. Однако это не так, потому что отношение между двумя событиями (измерением первой частицы и измерением второй частицы) – это не отношение причинно-следственной связи, а отношение корреляции. Корреляция – это статистическая взаимосвязь случайных величин. При этом изменения значений одной или нескольких из этих величин сопутствуют систематическому изменению значений другой или других величин. У первой частицы проекция спина (на любую ось) при каждом измерении оказывается положительной с вероятностью $1/2$ и отрицательной с той же вероятностью. Экспериментатор не может управлять результатами измерения, и следовательно, не может послать сигнал в точку, где расположена вторая частица. Поэтому передача сигнала со скоростью, превышающей скорость света, невозможна.

Если две подсистемы не являются запутанными, то состояние всей системы описывается произведением

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle|\chi\rangle, \quad (\text{III.2})$$

где $|\psi\rangle$ и $|\chi\rangle$ - состояния подсистем. Такое состояние называется факторизованным. После взаимодействия подсистем друг с другом состояние может стать запутанным. В этом случае оно уже не является факторизованным (его нельзя представить в виде произведения волновых функций подсистем). Для двух подсистем запутанное состояние имеет вид

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle|\chi_1\rangle + |\psi_2\rangle|\chi_2\rangle). \quad (\text{III.3})$$

При этом состояние каждой из подсистем не является определённым, но между ними имеется корреляция.

Примером запутанных состояний является состояние электромагнитного поля и излучившего его атома (рис. 58). Пусть атом пролетает область взаимодействия с полем, например, полем резонатора. После короткого взаимодействия атом и поле оказываются пространственно разделёнными. Однако состояние общей системы оказывается перепутанным, так как состояние поля жёстко зависит от состояния атома:

$$|\Psi\rangle = |\psi_{\text{атом},1}\rangle|\chi_{\text{поле},1}\rangle + |\psi_{\text{атом},2}\rangle|\chi_{\text{поле},2}\rangle.$$

Время жизни такого перепутанного состояния может значительно превышать время взаимодействия.



Рис. 58. Запутанное состояние: двухуровневый атом и поле

ЭПР – парадокс активизировал исследования по фундаментальным вопросам квантовой теории. Прежде всего, он способствовал росту интереса к физике запутанных состояний. Когда такие состояния спустя три десятилетия были обнаружены экспериментально для фотонов, возник настоящий корреляционный бум, открывший дорогу новым практическим реализациям квантовой механики.

В том же 1935 г. Шрёдингер опубликовал статью «Современное состояние квантовой механики», которая была инициирована дискуссией, развернувшейся после появления работы Эйнштейна–Подольского–Розена. В статье Шрёдингера

сформулированы четыре основных положения, описывающие свойства квантовых объектов:

1. Суперпозиция. Состояния описываются линейной суперпозицией базисных состояний.
2. Интерференция. Результат измерений зависит от относительных фаз амплитуд в этой суперпозиции.
3. Квантовая запутанность (сцепленность), при которой полное знание о состоянии всей системы не соответствует такому же полному знанию о состоянии её частей.
4. Неклонируемость и неопределённость. Неизвестное квантовое состояние невозможно клонировать, а также наблюдать без его возмущения.

Анализируя «подводные камни» квантово-механического процесса измерения, Шрёдингер заострил ситуацию до парадокса, получившего известность как «парадокс кота Шрёдингера» (см. лекцию 6).

Разрешение этого парадокса может быть дано с помощью понятия запутанных состояний, на которое обращает внимание Шрёдингер в своей статье. Благодаря возможности образования запутанных состояний может происходить «усиление» квантовой суперпозиции, при которой микроскопические системы могут служить источником макроскопических следствий. В данном случае состояние кота (макроскопического объекта) определяется состоянием радиоактивного атома (микроскопической системы). Поскольку атом может находиться в суперпозиционном состоянии (распавшийся и нераспавшийся), то и кот тоже может пребывать в суперпозиции двух состояний: живого и мёртвого.

Механизм «усиления» сводится к следующему. Исходная квантовая система, находящаяся в состоянии суперпозиции, вступает во взаимодействие с другими системами, вызывающее запутывание с ними. Затем и исходная система, и запутанные с ней системы, в свою очередь, взаимодействуют с ещё большим количеством систем. В конечном итоге возникает запутывание исходной системы с макроскопической системой и образуется суперпозиция двух различных состояний макросистемы, в нашем примере – суперпозиция двух состояний

«шрёдингерского кота» (который, безусловно, является макросистемой, состоящей из большого числа атомов).

При взаимодействии с внешним миром состояние суперпозиции разрушается, возникает её декогеренция. Декогеренция квантовой системы, означающая появление у неё классических черт, возникает при любом измерении.

Явление декогеренции стало предметом детального изучения в связи с квантовой теорией измерений, начиная с работ немецкого физика Дитера Цее (1970 г.). В 2004 г. исследовательской группе Антона Цайлингера из Венского университета удалось экспериментально наблюдать волновые свойства макромолекул и тепловую декогеренцию молекул фуллерена C_{70} (фуллерены – это замкнутые молекулы, содержащие десятки атомов углерода, образующие правильные пяти- и шестиугольники на поверхности сферы). Пучок молекул фуллерена при попадании на дифракционную решётку обнаруживал волновые свойства: на экране наблюдалась контрастная интерференционная картина. Под воздействием лазерного облучения происходил нагрев молекул, и они становились источником тепловых фотонов. При этом картина интерференции становилась менее контрастной. С увеличением мощности нагрева и повышением температуры длина волны испускаемых фотонов становилась настолько короткой, что позволяла проследить траекторию молекулы и определить, через какую именно щель она проходит. Т.е. молекулы начинали вести себя как классические частицы, картина интерференции исчезала. Когерентная квантовая суперпозиция разрушалась путём испускания тепловых фотонов.

В течение 30 лет после появления работ ЭПР и Шрёдингера проблема квантовых корреляций практически не обсуждалась, и никакие эксперименты в этом направлении не проводились. Она была, скорее, предметом чисто философских дискуссий. Ситуация изменилась после появления работ Джона Белла из Европейской организации ядерных исследований (ЦЕРН, Женева), который продолжил анализ ЭПР-парадокса и в 1964 г. сформулировал теорему (известную как неравенства Белла), согласно которой предсказания локальных моделей со скрытыми параметрами несовместимы со статистическими предсказаниями

квантовой механики. Результаты Белла послужили теоретической основой для экспериментальной проверки ЭПР-парадокса и подтверждения существования квантовой запутанности.

Для рассмотрения парадокса ЭПР Белл ввёл фотонные пары, находящиеся в сцепленном состоянии. Базисные состояния Белла, описывающие два однофотонных пучка, имеют вид:

$$|\Phi^+\rangle = \frac{|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 + |\leftrightarrow\rangle_1 |\leftrightarrow\rangle_2}{\sqrt{2}}, \quad (\text{III.3,а})$$

$$|\Phi^-\rangle = \frac{|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 - |\leftrightarrow\rangle_1 |\leftrightarrow\rangle_2}{\sqrt{2}}, \quad (\text{III.3,б})$$

$$|\Psi^+\rangle = \frac{|\uparrow\rangle_1 |\leftrightarrow\rangle_2 + |\leftrightarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2}{\sqrt{2}}, \quad (\text{III.3,в})$$

$$|\Psi^-\rangle = \frac{|\uparrow\rangle_1 |\leftrightarrow\rangle_2 - |\leftrightarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2}{\sqrt{2}}. \quad (\text{III.3,г})$$

Они представляют собой суперпозицию состояний пар одинаково поляризованных фотонов ($|\uparrow\uparrow\rangle$ и $|\leftrightarrow\leftrightarrow\rangle$) и ортогонально поляризованных фотонов ($|\uparrow\leftrightarrow\rangle$ и $|\leftrightarrow\uparrow\rangle$). Каждое из запутанных состояний (III.3) обладает следующим свойством: как только при каком-либо измерении один из фотонов проецируется на состояние с определённой поляризацией, так сразу поляризация фотона из другого пучка становится также определённой. Например, для состояний $|\Psi^+\rangle$ и $|\Psi^-\rangle$ при обнаружении одного из фотонов с горизонтальной поляризацией $|\leftrightarrow\rangle$ поляризация другого оказывается вертикальной $|\uparrow\rangle$. Т.е. измерение, производимое над одной частицей, может мгновенно влиять на состояние другой, которая может быть удалённой на произвольное расстояние.

Первые эксперименты по исследованию корреляций поляризации фотонов были проведены в 1969 г. (Дж. Клаузер, М. Хорн, Р. Хольт, А. Шимони). Оказалось, что запутанные пары фотонов испускаются при каскадных переходах в атомах. Атомы кальция, находящиеся в вакуумной камере, возбуждаются с помощью лазеров. Возвращение из возбуждённого состояния в основное происходит путём каскадного перехода, при котором полный момент импульса J атома меняется в последовательности $(J = 0) \rightarrow (J = 1) \rightarrow (J = 0)$, т.е. в результате излучения двух фотонов полный момент импульса атома не меняется и, следовательно,

суммарный момент двух фотонов равен нулю. Фотоны разлетаются в противоположных направлениях. С помощью фильтров и линз можно было добиться того, чтобы один из них падал на первый поляризационный анализатор, а другой — на второй. Изменяя относительную ориентацию анализаторов и регистрируя число фотонных пар, прошедших через них при четырех возможных комбинациях относительного расположения, можно было измерить корреляцию в прохождении фотонных пар (рис. 59).

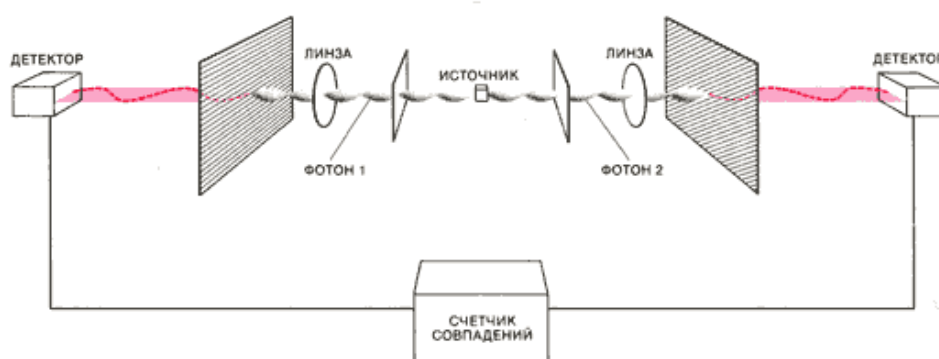


Рис. 59. Эксперименты по обнаружению корреляции между прохождением или задержкой фотонов в анализаторах

Убедительным доказательством существования квантовых корреляций поляризации фотонов явились эксперименты Алана Аспекта и его коллег из Оптического института Парижского университета, проведенные в 1982 г. В этих экспериментах выбор ориентации анализаторов производился оптическими переключателями во время полета фотонов. Процесс переключения ориентации занимал около 10 нс. Расстояние между анализаторами составляло 13 м, так что сигнал с максимально возможной скоростью, равной скорости света, мог распространиться от одного анализатора до другого за 40 нс. Т.е. возможность связи фотонов через известные физические процессы была исключена, выбор ориентации первого поляризационного анализатора не мог повлиять на прохождение фотоном второго анализатора, и наоборот.

В настоящее время физика запутанных состояний, кроме фотонных пар, охватывает различные системы, среди которых наиболее известными являются атомы и ионы, захваченные в ловушках различного типа, ядерные спины, запутанные состояния в твёрдотельных системах. Свойства запутанных состояний используются для разработки новых практических приложений квантовой механики, одним из которых является квантовая телепортация.

Квантовая телепортация – это перенос квантового состояния с одного объекта на другой без прямого взаимодействия между ними при помощи разъединенной в пространстве запутанной пары и классического канала связи. При этом состояние разрушается в точке отправления при проведении измерения, затем воссоздается в точке приема. Сам объект (например, фотон) не перемещается в пространстве, речь идет лишь о переносе квантового состояния, т.е. информации.

Для объяснения схемы телепортации традиционно используются персонажи с именами Алиса и Боб (рис. 60).

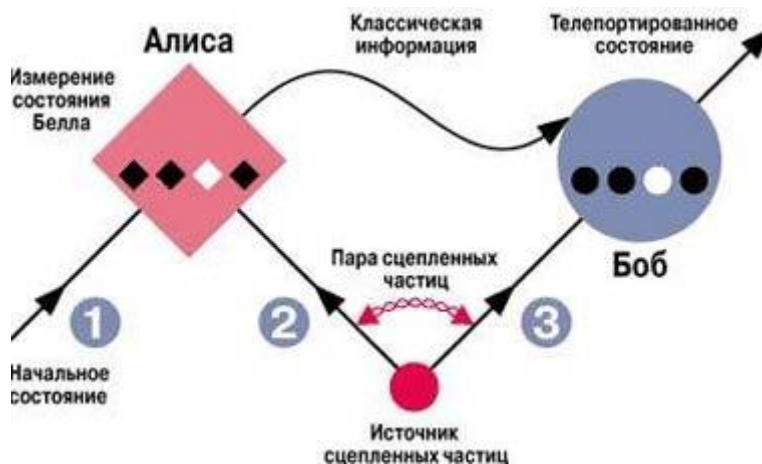


Рис. 60. Схема квантовой телепортации

Алиса имеет у себя частицу 1(фотон) в некотором неизвестном ей состоянии

$$|\Psi\rangle_1 = \alpha|\leftrightarrow\rangle_1 + \beta|\updownarrow\rangle_1. \quad (\text{III.4})$$

Эта частица является объектом телепортации. Алиса проводит измерение над своей исходной частицей и одной из частиц (2) пары фотонов, посылаемых ЭПР-источником и находящихся в запутанном состоянии

$$|\Psi^-\rangle_{23} = \frac{|\updownarrow\rangle_2 |\leftrightarrow\rangle_3 - |\leftrightarrow\rangle_2 |\updownarrow\rangle_3}{\sqrt{2}}. \quad (\text{III.5})$$

Фотоны 2 посылаются Алисе, а фотоны 3 – Бобу. В момент измерения Алисой состояний Белла фотон 1 становится компонентой поляризационно перепутанной пары фотонов 1 и 2, т.е. теряет свою индивидуальность. Его начальное состояние $|\Psi\rangle_1$ разрушается. Вместо него возникает состояние, которое является произведением состояний $|\Psi\rangle_1$ и $|\Psi^-\rangle_{23}$ [15]:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_1 |\Psi^-\rangle_{23} = & \\ & |\Psi^-\rangle_{12} \frac{\alpha|\leftrightarrow\rangle_3 + \beta|\updownarrow\rangle_3}{\sqrt{2}} + |\Psi^+\rangle_{12} \frac{-\alpha|\leftrightarrow\rangle_3 + \beta|\updownarrow\rangle_3}{\sqrt{2}} + \\ & + |\Phi^+\rangle_{12} \frac{-\beta|\leftrightarrow\rangle_3 + \alpha|\updownarrow\rangle_3}{\sqrt{2}} + |\Phi^-\rangle_{12} \frac{\beta|\leftrightarrow\rangle_3 + \alpha|\updownarrow\rangle_3}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

Из волновой функции (III.6) трёх частиц, две из которых находятся у Алисы, а одна у Боба, следует, что если Алиса спроецирует частицы 1 и 2 на состояние $|\Psi^-\rangle_{12}$, то состояние частицы 3 на станции Боба мгновенно редуцируется к состоянию первой частицы

$$|\Psi\rangle_3 = \alpha|\leftrightarrow\rangle_3 + \beta|\updownarrow\rangle_3. \quad (\text{III.7})$$

Таким образом, производя измерение белловских состояний, образующихся при смешении на зеркале фотонов 1 и 2, Алиса осуществляет мгновенную редукцию состояния фотона 3 к первоначальному состоянию фотона 1. В одном случае из четырёх два детектора F_1 и F_2 сработают одновременно, давая Алисе знать, что

одновременно состояние частицы 3 стало таким, какое было у первоначального фотона 1, т.е. произошла телепортация состояния $|\Psi\rangle_1$ (рис. 61).

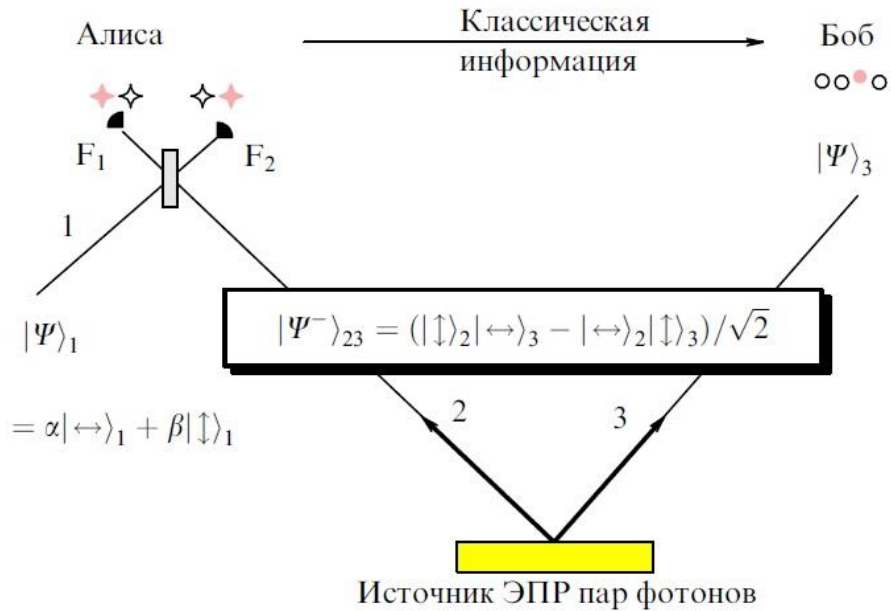


Рис. 61. Мгновенная редукция состояния фотона 3 на станции Боба к состоянию фотона 1

Телепортация не предполагает передачу информации о факте её осуществления. О том, что телепортация произошла, знает только Алиса, а Боб не знает. При этом Алиса может и не знать, какое именно состояние фотона 1 она передаёт. Белловские связанные состояния (III.6) обуславливают четыре возможных результата Алисиного измерения. Определив номер полученного состояния – 1, 2, 3 или 4, Алиса по классическому каналу связи (телефон, интернет и др.) посылает эту информацию Бобу, после чего Боб должен сделать одну из четырех возможных операций над своей частицей. В результате он получает фотон в точно таком же состоянии, в котором до измерения был фотон у Алисы.

Идея о возможности квантовой телепортации была сформулирована в 1993 г. Чарльзом Беннетом. Практическую реализацию она получила в 1997 г. в экспериментах двух групп исследователей – Антона Цайлингера (университет в Инсбруке, Австрия) и Франческо де Мартини (университет в Риме, Италия). В этих опытах удалось передать поляризационное состояние фотона на расстояние порядка 10 км. В 2012 г. группа Цайлингера осуществила передачу квантового состояния двух запутанных фотонов между двумя Канарскими островами, расстояние между которыми составляет почти 150 км.

Работа Цайлингера и последовавшие за ней эксперименты позволили переместить информационные аспекты квантовой механики с уровня «мысленных экспериментов» в разряд «практически значимых». До этого идея телепортации встречалась лишь на страницах произведений писателей-фантастов, где она понималась как мгновенное перемещение предмета из одного места в другое (тело исчезает в одном месте и мгновенно появляется в другом).

В 1928 г. Эйнштейн писал Шрёдингеру: «Философия успокоения Гейзенберга–Бора (или религия?) так тонко придумана, что предоставляет верующему до поры до времени мягкую подушку, с которой его не так легко спугнуть. Пусть спит...». В 1944 г. в письме Борну, выражая своё неприятие вероятностной трактовки квантовой механики, он писал: «Большие первоначальные успехи теории квантов не могли меня заставить поверить в лежащую в ее основе игру в кости...». Однако успехи практических приложений квантовой механики требуют признания «странных» свойств квантового мира – случайности, вероятностного описания и нелокальности.

ПРИЛОЖЕНИЕ IV. Система двух связанных осцилляторов.

Силы Ван-дер-Ваальса

КОУГЯ для системы двух связанных ЛГО, по аналогии с (11.7), имеет вид

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x_1} \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x_2} \right)^2 - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x_1^2} - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x_2^2} + \frac{m}{2} \omega_0^2 (x_1^2 + x_2^2) + \lambda x_1 x_2 = E, \quad (\text{IV.1})$$

где

$$\lambda = \frac{e^2}{R^3},$$

x_1 и x_2 – мгновенные смещения электронов относительно ядер, R – межъядерное расстояние. С помощью подстановки $f_1 = \frac{\partial S}{\partial x_1}$, $f_2 = \frac{\partial S}{\partial x_2}$ уравнение (IV.1) приводится к дифференциальному уравнению первого порядка

$$\frac{1}{2m} (f_1^2 + f_2^2) - \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1} + \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right) + \frac{m}{2} \omega_0^2 (x_1^2 + x_2^2) + \lambda x_1 x_2 = E. \quad (\text{IV.2})$$

Его решение может быть представлено в виде линейной комбинации

$$\begin{cases} f_1 = \frac{im}{2} (\alpha x_1 + \beta x_2), \\ f_2 = \frac{im}{2} (\beta x_1 + \alpha x_2), \end{cases} \quad (\text{IV.3})$$

где α и β – постоянные коэффициенты. Подстановка функций (IV.3) в КОУГЯ (IV.2) приводит к системе уравнений

$$\begin{cases} E = \frac{\hbar\alpha}{2}, \\ \alpha^2 + \beta^2 = 4\omega_0^2, \\ m\alpha\beta = 2\lambda, \end{cases} \quad (\text{IV.4})$$

которая позволяет определить энергию двух связанных ЛГО

$$E = \frac{\hbar\omega_0}{2} \left(\sqrt{1 - \frac{\lambda}{m\omega_0^2}} + \sqrt{1 + \frac{\lambda}{m\omega_0^2}} \right). \quad (\text{IV.5})$$

При $\lambda = 0$ последнее выражение приводит к энергии двух независимых осцилляторов

$$E_0 = 2 \frac{\hbar\omega}{2} = \hbar\omega. \quad (\text{IV.6})$$

При выполнении условий $\lambda \neq 0, \frac{\lambda}{m\omega_0^2} \ll 1$ имеют место равенства

$$\omega_1 = \omega_0 \left[1 - \frac{\lambda}{2m\omega_0^2} - \frac{1}{8} \left(\frac{\lambda}{m\omega_0^2} \right)^2 \right], \quad (\text{IV.7})$$

$$\omega_2 = \omega_0 \left[1 + \frac{\lambda}{2m\omega_0^2} - \frac{1}{8} \left(\frac{\lambda}{m\omega_0^2} \right)^2 \right]. \quad (\text{IV.8})$$

После суммирования (IV.7) и (IV.8) и умножения на \hbar из (IV.4) получается выражение для энергии двух связанных ЛГО как функция межъядерного расстояния

$$E_0(R) = \hbar\omega_0 - \frac{\hbar}{8} \frac{e^4}{m^2\omega_0^3 R^6}. \quad (\text{IV.9})$$

Такая зависимость энергии от расстояния $E_0(R) \sim -\frac{1}{R^6}$ характерна для сил Ван-дер-Ваальса $F \sim \frac{1}{R^7}$. Таким образом, Ван-дер-Ваальсово притяжение нейтральных атомов возникает в результате уменьшения энергии нулевых колебаний при взаимном сближении осцилляторов.

ПРИЛОЖЕНИЕ V. Из истории создания волновой механики Шрёдингера

Предпосылкой для создания волновой механики явилось знакомство Шрёдингера в начале ноября 1925 года с диссертацией Луи де Бройля, содержащей идею о волновых свойствах вещества, а также со статьёй Эйнштейна по квантовой теории газов, в которой цитировалась работа французского учёного [36, с. 496]. О важнейшей роли Эйнштейна в восприятии Шрёдингером идей де Бройля свидетельствует письмо Шрёдингера от 23 апреля 1926 г.: «...всё это дело не возникло бы ни теперь, ни когда-либо позже (я имею в виду свое участие), если бы Вы в Вашей второй статье о квантовой теории газов не щелкнули меня по носу, указав на важность идей де Бройля» [35, с. 161].

К этим обстоятельствам следует также добавить и попытки самого Шрёдингера понять спектроскопические закономерности атомной физики.

«К современной теории атома я приближался очень медленно, – вспоминал он, – её внутренние противоречия звучат как пронзительные диссонансы, по сравнению с чистой, неумолимо ясной последовательностью мысли Больцмана. Было время, когда я прямо-таки готов был обратиться в бегство, однако, побуждаемый Экснером и Кольраушем, нашёл спасение в учении о цвете. Известное облегчение впервые доставила мне идея де Бройля об электронных волнах, которые я использовал для построения волновой механики. Однако мы ещё довольно далеки от действительного постижения того понимания природы, которое подготовлено, с одной стороны, волновой механикой, а с другой, – квантовой механикой Гейзенберга» [35, с. 339].

Об обстановке, в которой Шрёдингер начал свою работу по волновой механике, П. Дебай вспоминал: «В это время Шрёдингер получил мою кафедру в Цюрихском университете, а я был в Техническом университете, который является Федеральными институтом, и мы проводили совместный семинар. Мы говорили

о теории де Бройля и согласились в том, что мы ее не понимаем и что мы должны подумать о его формулировках и о том, что она реально означает. Тогда я предложил Шрёдингеру провести colloquium. И приготовления к нему подтолкнули его начать работу. Прошло всего несколько месяцев между этим разговором и его публикациями».

Эрвин Шрёдингер всерьез воспринял идеи де Бройля, о чем впоследствии написал: «В эти дни я вплотную занимаюсь талантливой диссертацией де Бройля. Она очень занимательна». Работа де Бройля окончательно утвердила в физике идею симметрии материи относительно свойств волн и частиц. В 1905 г. Эйнштейн установил, что у световых волн есть свойства частиц; в 1924 г. де Бройль предсказал, что у частиц вещества есть свойства волн. «Для того чтобы рискнуть сделать этот вывод, требовалось так много мужества... что, по-видимому, только два физика – сам Эйнштейн и Луи де Бройль – решились на это», – говорил один из создателей матричной квантовой механики Паскуаль Иордан.

Успех деятельности Шрёдингера на пути создания волновой механики был обеспечен владением соответствующим математическим аппаратом, в частности методикой решения задач на собственные значения. В 1924 г. вышла в свет книга Р. Куранта и Д. Гильберта «Методы математической физики», в которой содержалась вся необходимая математическая база для решения уравнений типа уравнения Шрёдингера.

На рубеже 1925–26 г. Шрёдингер направил в редакцию немецкого физического журнала «Annalen der Physik» статью, где было приведено полученное им релятивистское волновое уравнение. Но спустя несколько дней забрал рукопись из редакции, поскольку полного согласия с экспериментальными данными не было достигнуто. Причиной такой «неудачи» являлось то, что он не учел спин электрона. В итоге релятивистское волновое уравнение, полученное Шрёдингером, известно теперь как уравнение Клейна–Фока–Гордона для частиц без спина (1926 г.). Вероятно, правильнее было бы называть его релятивистским уравнением Шрёдингера.

Шрёдингер взялся за переработку рукописи, сосредоточившись на разработке нерелятивистского приближения. И уже в конце января 1926 г. в редакцию «Annalen der Physik» поступило первое сообщение «Квантование как задача о собственных значениях» («Quantisierung als Eigenwertproblem»), открывшее целую серию работ австрийского физика. В этой работе и пяти последующих Шрёдингером были заложены основы *волновой механики*.

Эти работы были написаны, можно сказать, «на одном дыхании», за полгода – с января по июнь 1926 г. Первое сообщение поступило в «Annalen der Physik» 27 января 1926 г., второе – 23 февраля 1926 г., третье – 10 мая 1926 г, четвертое – 21 июня 1926 г. В этот же период в «Naturwissenschaften» была опубликована статья «Непрерывный переход от микро- к макромеханике», а 18 марта 1926 г. в редакцию «Annalen der Physik» была направлена работа «Об отношении квантовой механики Гейзенберга–Борна–Иордана к моей». Спустя 35 лет Макс Борн писал: «Что существует более выдающегося в теоретической физике, чем его первые шесть работ по волновой механике?».

В первой статье Шрёдингер получил волновое уравнение, известное теперь как не зависящее от времени (стационарное) уравнение Шрёдингера, и применил его к нахождению дискретных энергетических уровней атома водорода. В своей работе Шрёдингер проводит сравнение с колебаниями струны. Как известно из курса «Математическая физика», решением волнового уравнения Даламбера для струны, закреплённой с двух концов, является система стоячих волн. При этом собственные значения этого дифференциального уравнения определяются целыми числами, вытекающими из граничных условий. Аналогично, если рассматривать атом как колебательную систему, в которой возможные собственные колебания соответствуют устойчивым энергетическим состояниям, то целочисленные правила квантования появляются «естественным образом, сами по себе, подобно тому, как сама по себе получается целочисленность числа узлов при рассмотрении колеблющейся струны. Это новое представление может быть обобщено, – пишет Шрёдингер, – и я думаю, что оно тесно связано с истинной природой квантования» [35, с. 8].

«Существенным мне кажется то, – продолжает Шрёдингер, – что квантовые правила не вводятся больше как загадочное «требование целочисленности», а определяются необходимостью ограниченности и однозначности некоторой определенной пространственной функции» [35, с. 17]. Эта функция, получившая впоследствии название волновой функции, была формально введена как величина, логарифмически связанная с действием системы. Шрёдингер начинает формулировать свою версию квантования с хорошо известного уравнения Гамильтона–Якоби для консервативной системы:

$$H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = E. \quad (\text{V.1})$$

Далее вместо действия S Шрёдингер вводит новую функцию Ψ согласно условию:

$$S = K \ln \Psi, \quad (\text{V.2})$$

где K имеет размерность действия. Получается следующее уравнение:

$$H\left(q, \frac{K}{\Psi}, \frac{\partial \Psi}{\partial q}\right) = E. \quad (\text{V.3})$$

Затем Шрёдингер пишет, что это уравнение можно свести к такому виду, при котором квадратичная форма от функции Ψ и ее первых производных равна нулю.

Следующая фраза является ключевой для всей первой работы Шрёдингера по волновой механике. «Ищем такую действительную во всем конфигурационном пространстве однозначную, ограниченную, дважды дифференцируемую функцию Ψ , которая дает экстремальное значение интегралу от упомянутой квадратичной формы, распространенному по всему конфигурационному пространству. Эта вариационная проблема и заменяет у нас квантовые условия». В качестве функции H Шрёдингер выбирает, в первую очередь, гамильтониан для задачи Кеплера. И показывает, что указанная вариационная проблема имеет непрерывную и дискретную области спектра собственных значений. Дискретная часть энергетического спектра (E) совпадает с уровнями энергии Бора, т.е. соответствует бальмеровским термам, а непрерывная – движению по гиперболическим траекториям. При этом величина K приравнивалась к $\hbar/2\pi$.

В декартовой системе координат уравнение (V.3) было записано следующим образом:

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z}\right)^2 - \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right) \Psi^2 = 0. \quad (\text{V.4})$$

Таким образом, впервые в физику была введена *волновая функция* микрочастицы, хотя в рассматриваемой работе Шрёдингера этот термин еще отсутствует.

Далее Шрёдингер пишет: «и наша вариационная проблема примет вид»:

$$\delta J = \delta \iiint dx dy dz \left[\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} \right)^2 - \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \Psi^2 \right] = 0. \quad (\text{V.5})$$

Следовательно, должно быть справедливо уравнение

$$\Delta \Psi + \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \Psi = 0. \quad (\text{V.6})$$

Получившееся таким образом уравнение теперь называют *стационарным уравнением Шрёдингера* для атома водорода в координатном представлении. Оно допускает очевидное обобщение на любое потенциальное поле и является одной из вершин работы Эрвина Шрёдингера как физика-теоретика.

Отмечая, что исходным толчком для его работы явилась диссертация де Бройля, Шрёдингер подчеркивает различие двух подходов. В теории де Бройля рассматривается прямолинейно распространяющаяся волна, а в волновой механике Шрёдингера рассматриваются стоячие собственные колебания.

Второе сообщение, датированное 23 февраля 1926 г., логически предшествует первому. Здесь учёный подробно излагает свои соображения, которые привели его к формулировке волновой механики. И в первую очередь, речь идет об оптико-механической аналогии Гамильтона: «Быть может, наша классическая механика представляет полную аналогию с геометрической оптикой и подобно последней отказывается служить и не согласуется с действительным положением вещей при размерах и радиусе кривизны траекторий, приближающихся по величине к некоторой длине волны, которая теперь принимает в q – пространстве реальный смысл. Тогда целесообразно попытаться построить «волновую механику», и первым шагом на этом пути является, конечно, волновое истолкование представлений Гамильтона» [35, с. 27].

В этой работе сделан вывод о равенстве скорости частицы групповой скорости волнового пакета.

3. *Quantisierung als Eigenwertproblem;*
 von *E. Schrödinger.*

(Erste Mitteilung.)

§ 1. In dieser Mitteilung möchte ich zunächst an dem einfachsten Fall des (nichtrelativistischen und ungestörten) Wasserstoffatoms zeigen, daß die übliche Quantisierungsvorschrift sich durch eine andere Forderung ersetzen läßt, in der kein Wort von „ganzen Zahlen“ mehr vorkommt. Vielmehr ergibt sich die Ganzzahligkeit auf dieselbe natürliche Art, wie etwa die Ganzzahligkeit der *Knotenzahl* einer schwingenden Saite. Die neue Auffassung ist verallgemeinerungsfähig und rührt, wie ich glaube, sehr tief an das wahre Wesen der Quantenvorschriften.

Die übliche Form der letzteren knüpft an die Hamiltonsche partielle Differentialgleichung an:

$$(1) \quad H\left(q, \frac{\delta S}{\delta q}\right) = E.$$

Es wird von dieser Gleichung eine Lösung gesucht, welche sich darstellt als *Summe* von Funktionen je einer einzigen der unabhängigen Variablen q .

Wir führen nun für S eine neue unbekannte ψ ein derart, daß ψ als ein *Produkt* von eingriffigen Funktionen der einzelnen Koordinaten erscheinen würde. D. h. wir setzen

$$(2) \quad S = K \lg \psi.$$

Die Konstante K muß aus dimensionellen Gründen eingeführt werden, sie hat die Dimension einer *Wirkung*. Damit erhält man

$$(1') \quad H\left(q, \frac{K}{\psi} \frac{\delta \psi}{\delta q}\right) = E.$$

Wir suchen nun *nicht* eine Lösung der Gleichung (1'), sondern wir stellen folgende Forderung. Gleichung (1') läßt sich bei Vernachlässigung der Massenveränderlichkeit stets, bei Berücksichtigung derselben wenigstens dann, wenn es sich um das *Ein*-elektronenproblem handelt, auf die Gestalt bringen: quadratische

Рис. 62. Первая страница статьи «Квантование как задача о собственных значениях»

На основе своего уравнения Шрёдингер приводит решение ряда характерных квантово-механических задач: о линейном гармоническом осцилляторе, о жестком ротаторе и упругом ротаторе (модели двухатомной молекулы).

18.03.1926 г. выходит очередная работа Шрёдингера «Об отношении квантовой механики Гейзенберга–Борна–Иордана к моей», в которой показана математическая эквивалентность матричной механики и волновой механики Шрёдингера.

В третьем сообщении, датированном 10 мая 1926 г., построена теория возмущений, не зависящих от времени. Этот метод был применён Шрёдингером к описанию эффекта Штарка для атома водорода и дал хорошее согласование с экспериментальными данными.

В четвертом, июньском, сообщении Шрёдингер сформулировал уравнение, позже названное нестационарным (временным) уравнением Шрёдингера, и использовал его для развития теории зависящих от времени возмущений

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x, y, z, t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \quad (\text{V.7})$$

Это уравнение применяется им к задаче о дисперсии света, при этом роль возмущения играет периодически изменяющаяся потенциальная энергия, связанная с вектором электрической напряженности световой волны, взаимодействующей с атомом. Теория дисперсии, построенная Шрёдингером на основе волново-механических представлений, по своим результатам совпадала с матрично-механическим вариантом этой теории, развитым ранее в работах Гейзенберга, Крамерса, Борна и Иордана.

В этом же четвертом сообщении Шрёдингер обсуждает явление отрицательной дисперсии, комбинационное рассеяние света, а также резонансные явления, при которых частота падающей волны совпадает с одной из собственных частот атома. В этой работе было также представлено релятивистское обобщение основного уравнения теории, которое было получено Шрёдингером ещё на начальном этапе работы (уравнение Клейна–Фока–Гордона). В заключительной части работы Шрёдингер обсуждает физический

смысл волновой функции Ψ , вводит представление о весовой функции в конфигурационном пространстве, описывающей распределение пространственной плотности электрического заряда.

Восторженные отклики теория Шрёдингера получила, в первую очередь, со стороны ученых старшего поколения, воспитанных в духе классической физики. Например, В. Вин говорил о ней, как о «выдающемся шаге в прояснении квантовой теории», и выражал надежду, что наконец-то больше не придется «плескаться в болоте полуцелых и целочисленных квантовых последовательностей» и что восторжествует «здравый физический смысл». А молодые теоретики, с одной стороны, признавали, что в физико-математическом отношении работы Шрёдингера относятся к числу «важнейших трудов, появившихся в последнее время», но при этом высказывались весьма критично. Например, основатель матричной квантовой механики В. Гейзенберг считал, что «в принципиальных физических вопросах... ради общедоступной наглядности волновая механика уводит нас с прямого пути, намеченного, с одной стороны, работами Эйнштейна и де Бройля, а с другой – результатами Бора и квантовой механикой». В. Паули даже окрестил теорию Шрёдингера «цюрихской ересью».

Важным для выработки понимания квантовой механики явился приезд Шрёдингера в Копенгаген в сентябре 1926 г., куда его пригласил Нильс Бор с надеждой достичь согласия между волновой и матричной формулировками квантовой механики. Из воспоминаний Вернера Гейзенберга: «Дискуссии между Бором и Шрёдингером начались прямо на вокзале и продолжались с раннего утра до поздней ночи. Шрёдингер остановился у Бора в доме, так что никакие посторонние обстоятельства не мешали их разговорам... Беседы длились по многу часов днем и даже ночью, однако согласия достигнуто не было. Через несколько дней Шрёдингер заболел от чрезвычайного перенапряжения; жар и простуда заставили его слечь в постель. Фрау Бор ухаживала за ним, приносила ему чай и сладости, а Нильс Бор сидел на краешке кровати и внушал Шрёдингеру: «Вы все-таки должны понять, что...». К подлинному взаимопониманию и нельзя было тогда прийти, поскольку ни одна из сторон не могла предложить полной и цельной интерпретации квантовой механики».

В отчаянии Шрёдингер восклицал: «Если нельзя избавиться от этих проклятых квантовых скачков, то я жалею, что вообще связался с квантовой теорией». На что Бор отвечал: «А вот мы, со своей стороны, очень благодарны Вам за то, что Вы сделали, поскольку Ваша волновая механика с её ясностью и простотой представляет огромный прогресс по отношению к прежним формам квантовой механики» [10, с. 201–203].

Большие сложности возникали с интерпретацией волновой функции. По этому поводу Эйнштейн заметил: «Но странным образом Шрёдингера постигла неудача: оказалось невозможным ассоциировать с этими волнами определенные движения материальных точек, – а ведь именно в этом состояла первоначальная цель всего построения» [37, с. 236].

Шрёдингер пытался трактовать волновую функцию наглядным образом, отождествляя ее с классическим пространственным распределением заряда электрона. При этом квантовый скачок рассматривался как постепенный переход из состояния, соответствующего собственному колебанию с энергией E_m , в состояние с энергией E_n . Излишек энергии ($E_m - E_n$), проявляющийся при перекачке ее от одной моды к другой, излучался в виде электромагнитной волны. Электрон рассматривался как электрически заряженное облако, обволакивающее атом, и преобразовывался в пространственно-распределенную электромагнитную волну, движущуюся непрерывно, без всякого квантового скачка. Ещё в своём первом сообщении (27.01.1926 г.) Шрёдингер писал: «Не требует особых разъяснений то обстоятельство, что представление, по которому при квантовом переходе энергия преобразуется из одной колебательной формы в другую, значительно более удовлетворительно, чем представление о перескакивающем электроны» [35, с. 19]. Он заявлял, что ему страшно представить, чтобы «электрон мог прыгать как блоха». Таким образом, квантовая механика примыкала к классической, и делалась попытка построить физическую теорию исключительно на базе волновых представлений, без использования концепции корпускулярно-волнового дуализма.

В работе «Непрерывный переход от микро- к макромеханике» Шрёдингер попытался заменить дискретные частицы волновыми пакетами. Учитывая, что заряд электрона во многих случаях может рассматриваться как локализованный

в достаточно малой области пространства, несмотря на волновой характер Ψ -функции, Шрёдингер стремился найти способ описания микрочастиц с помощью комбинации волн или соответствующих волновых функций. Однако волновой пакет расплывался за короткое время, что приводило к выводу о невозможности стабильных элементарных частиц в рамках теории Шрёдингера. Единственным объектом, который удавалось представить в виде волнового пакета, был линейный гармонический осциллятор. Шрёдингер надеялся в дальнейшем найти возможность построения аналогичных волновых пакетов и для других систем.

Впоследствии оказалось, что волновой пакет, построенный Шрёдингером, представляет собой пример когерентных состояний. Метод когерентных состояний получил широкое применение в квантовой теории поля, квантовой оптике, теории сверхтекучести, физике элементарных частиц и т.д.

«Трудность казалась непреодолимой, – писал Эйнштейн в 1940 г., – пока ее не победил Борн способом столь же простым, сколь и неожиданным. Волновые поля де Бройля–Шрёдингера не должны были трактоваться как математическое описание реального протекания события во времени и в пространстве, хотя они действительно имеют отношение к такому событию. Они являются скорее математическим описанием того, что мы можем в действительности знать о системе. Они служат только для представления статистических высказываний и предсказаний относительно результатов всех измерений, которые можно произвести над системой» [37, с. 236].

Летом 1926 г. Макс Борн установил, что квадрат модуля амплитуды волновой функции определяет вероятность, с которой частица может быть обнаружена в данном месте пространства. В то время как для Шрёдингера волновая функция относилась к числу наблюдаемых величин, для Борна она играла роль «направляющего поля» для электрона, закон изменения которого определялся уравнением Шрёдингера. Эйнштейн, иронизируя по этому поводу, называл его «призрачным полем» (*Gespensterfeld*). Шрёдингер отрицательно относился к копенгагенской трактовке квантовой теории, основой которой являлась статистическая интерпретация.

Надежды Шрёдингера на создание классической теории поля для атомных явлений не оправдались, но волновая механика Шрёдингера сыграла важнейшую роль в разработке математических методов квантовой механики. Сегодня уравнение Шрёдингера занимает одно из центральных мест в физике, а сам Шрёдингер по праву относится к числу великих физиков-теоретиков XX столетия.

Уравнение Шрёдингера – это линейное дифференциальное уравнение в частных производных. В силу свойства линейности это уравнение удовлетворяет принципу суперпозиции, который существенно облегчает описание линейных волновых процессов. В этой связи представляет интерес высказывание Луи де Бройля: «В моих нынешних представлениях я пришел к мысли, что для учета дуализма «волна – частица» необходимо развивать волновую механику, основанную на нелинейных уравнениях, по отношению к которым линейные уравнения были бы всего лишь приближенными формами, имеющими силу в определенных условиях».

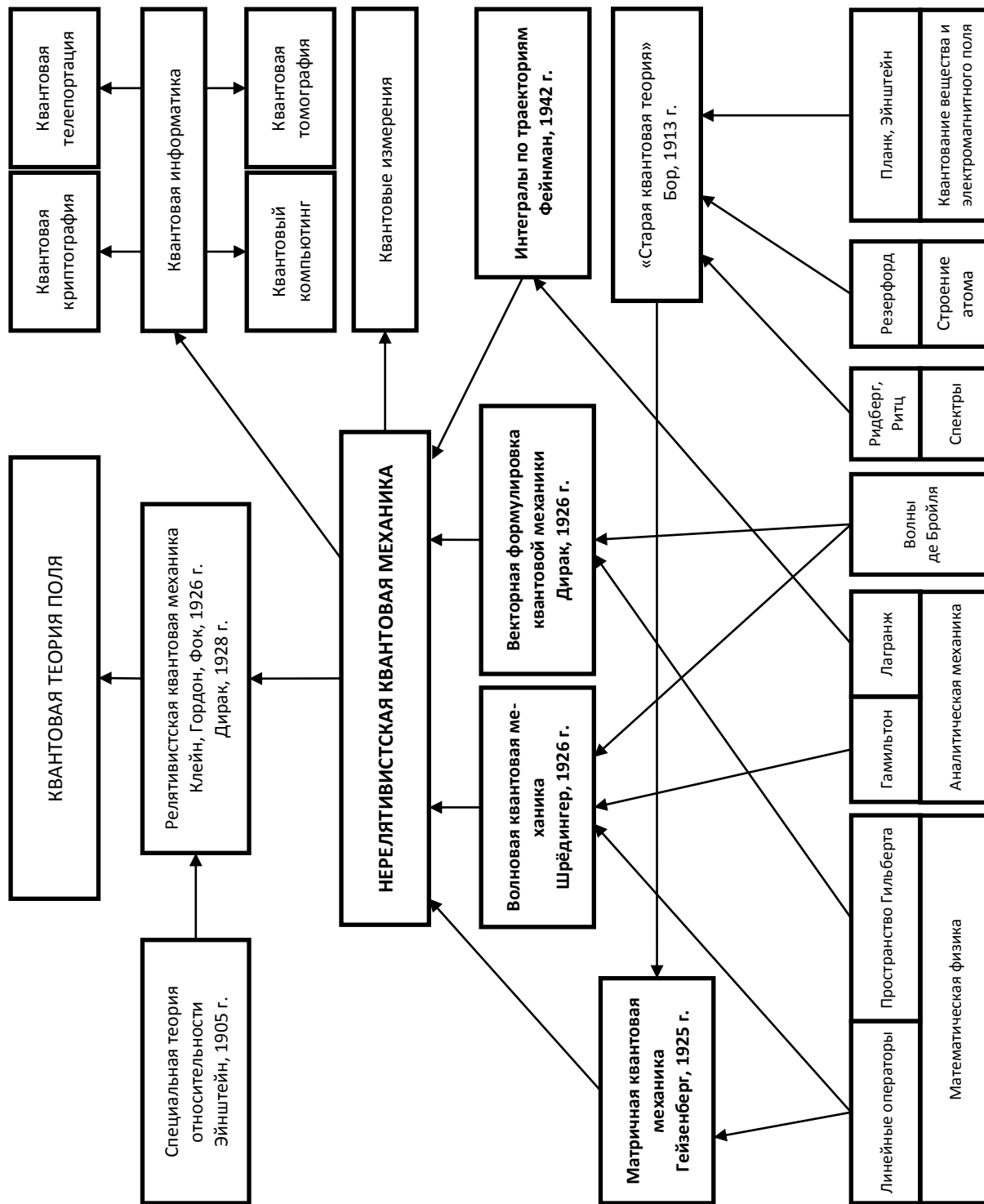
Данное изложение истории создания волновой механики Шрёдингера было представлено студенткой 4 курса М.В. Горюновой на юбилейной научной конференции «Путешествие в город Шрёдингер» (к 90-летию создания волновой механики Шрёдингера), состоявшейся на физико-математическом факультете ЮУрГГПУ 7 декабря 2016 г.

Волшебный этот город на карте не найти,
Однако мы сумели найти к нему пути.
Пусть столбовой дороги туда в помине нет,
Ему в стране «Наука» уж девяносто лет!

Там волновые свойства покоя не дают ($E_0 \neq 0$),
В почёте – вероятность, её лишь признают!
Там странные частицы, – причудлив их наряд,
И формул вереницы квантуют всё подряд.

Коль сложная задачка, – дружище, не ропщи,
Ответ на все вопросы в «ландавшице» ищи!
Найди решение строже, считать себя заставь,
Пусть с «классикой» не схоже, но дело не оставь!

ПРИЛОЖЕНИЕ VI. «Карта» нерелятивистской квантовой механики



Основные постулаты и принципы квантовой механики

Постулаты	Принципы
<p>1. Описание состояния системы с помощью волновой функции Ψ (или вектора состояния $\Psi\rangle$ в гильбертовом пространстве). Квадрат модуля $\Psi ^2$ определяет вероятность обнаружить частицу в данной точке пространства или вероятность того или иного результата измерения.</p> <p>2. Сопоставление механическим величинам линейных самосопряженных операторов.</p> <p>3. Постулат единственности собственного значения.</p> <p>4. Вероятность получить собственное значение ℓ_n при измерении в состоянии Ψ равна $W_n = c_n ^2$, где c_n – коэффициенты в разложении Ψ по ортонормированному базису</p> $\Psi = \sum_n c_n \Psi_n, \quad c_n = \langle \Psi_n \Psi \rangle.$ <p>Определением среднего значения механической величины является</p> $\bar{L} = \int_V \Psi^* \hat{L} \Psi dV = \langle \Psi \hat{L} \Psi \rangle.$ <p>5. Эволюция вектора состояния описывается уравнением Шрёдингера</p> $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$	<p>1. Суперпозиции состояний.</p> <p>2. Неопределенностей.</p> <p>3. Дополнительности.</p> <p>4. Соответствия.</p> <p>5. Неразличимости одинаковых микрочастиц.</p> <p>6. Запрета (принцип Паули)</p>

Наиболее известные интерпретации квантовой механики

1. **Копенгагенская** (Н. Бор, В. Гейзенберг, фон Нейман, М. Борн, В. Паули, П. Дирак), 1927 г.

Состояние микрочастицы (или системы) описывается с помощью волновой функции, которая полностью определяет все свойства системы в данном состоянии. За основу принимаются статистическая интерпретация волновой функции, постулат редукции фон Неймана (скачкообразный переход от суперпозиции состояний к одному из этих состояний в процессе взаимодействия микрообъекта с измерительным прибором), соотношение неопределенностей Гейзенберга, принцип дополнительности.

Волновая функция изменяется в результате двух процессов:

- 1) скачкообразное случайное изменение, вызванное наблюдением (или измерением);
- 2) детерминированная эволюция со временем, подчиняющаяся уравнению Шрёдингера.

2. **Концепция квантовых ансамблей** (Дж. Слэтер, Е. Кембл, К.В. Никольский, Л.И. Мандельштам, Д.И. Блохинцев), 30–40 гг. XX в.

Квантовый ансамбль напоминает классический ансамбль Гиббса из статистической термодинамики, представляющий собой совокупность большого числа тождественных копий микросистемы, находящихся в термостате с определенной температурой. Вероятность того или иного результата измерения термодинамической величины содержит как характеристики микросистемы, так и характеристику термостата (его температуру).

Квантовым ансамблем называется большое число частиц или систем, которые независимо друг от друга находятся в одинаковых макроскопических условиях. Волновая функция (т.е. амплитуда вероятности) описывает не одну частицу, а характеризует принадлежность её к определенному квантовому ансамблю. Свойства единичного микроявления устанавливаются посредством изучения статистических закономерностей совокупности таких явлений. На основе этой концепции построено изложение квантовой механики в учебнике Д.И. Блохинцева [1].

3. Многомировая интерпретация

Предложена в 1957 г. Х. Эвереттом и развита Дж. Уилером. Поэтому часто называется интерпретацией Эверетта–Уилера.

Согласно этой интерпретации квантово-механическое взаимодействие объекта и наблюдателя приводит к образованию совокупности разных миров, число которых равно числу физически возможных исходов этого взаимодействия. И все эти миры реальны. Реализуются все исходы квантового взаимодействия наблюдателя и объекта, но каждый из них осуществляется в своей классической реализации физического мира («параллельной вселенной»). В многомировой интерпретации нет недетерминированного коллапса (или редукции) волновой функции, сопутствующего измерению в копенгагенской трактовке. В рассмотрение вводится квантовая сцепленность и обратимая эволюция состояний.

Различные (классически несовместимые) картины мира сосуществуют в квантовом мире, и лишь в сознании наблюдателя появляется единственная классическая картина мира. Наглядно это интерпретируется так: существуют различные классические миры (эвереттовские параллельные миры), из которых сознание наблюдателя воспринимает лишь один.

Если в теории декогеренции возможны разные результаты измерения, но реализуется лишь один с определенной вероятностью, то в теории Эверетта все результаты измерения одинаково реальны, но реализуются они в разных мирах. Проблема выбора результатов измерения теперь переформулируется следующим образом: «В каком из эвереттовских миров оказался данный наблюдатель?».

Дж. Уилер предложил следующую наглядную трактовку: в момент квантового измерения перед наблюдателем как бы оказывается железнодорожная стрелка, и его поезд может пойти в одном из нескольких направлений. В зависимости от того, по какому пути пойдет поезд, – наблюдатель увидит тот или иной результат измерения. Поезд всегда пойдет лишь по одному из направлений, но остальные столь же реальны, и в любом другом направлении то же самое измерение даст уже другой результат.

Почему результаты измерений выбираются с разными вероятностями, которые предсказываются квантовой механикой? В теории Эверетта показывается, что среди параллельных миров есть тождественные. При этом мир некоторого типа встречается тем чаще, чем больше квантово-механическая вероятность соответствующей альтернативы.

Мысль о включении сознания в квантовую теорию была сформулирована в 30-х годах XX века в период становления квантовой механики психологом Карлом Густавом Юнгом совместно с Вольфгангом Паули. Роль сознания в интерпретации квантовой механики широко обсуждается и в современной науке. Интересные идеи в этом направлении принадлежат, в частности, английскому физику и математику Роджеру Пенроузу («Новый ум короля»), рассматривающему работу мозга как существенно квантовый процесс. Сознание, по-видимому, имеет квантовую природу и должно рассматриваться как один из этапов квантового измерения [22].

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Блохинцев, Д.И. Основы квантовой механики / Д.И. Блохинцев. – М.: Наука, 1983. – 664 с.
2. Байков, Ю.А. Квантовая механика / Ю.А. Байков, В.М. Кузнецов. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. – 292 с.
3. Баргатин, И.В. Запутанные квантовые состояния атомных систем / И.В. Баргатин, Б.А. Гришанин, В.Н. Задков // УФН, 2001. – Т. 171. – № 6. – С. 625–647.
4. Белинский, А.В. Квантовые измерения / А.В. Белинский. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. – 182 с.
5. Борисов, А.В. Основы квантовой механики / А.В. Борисов. – М.: МГУ, 1999. – 88 с.
6. Бройль, Л. Избранные научные труды. Т. 1. Становление квантовой физики. Работы 1921–1934 годов / Луи де Бройль. – М.: Логос, 2010. – 556 с.
7. Ведринский, Р.В. Квантовая механика / Р.В. Ведринский. – Ростов-н/Д: Южный федеральный университет, 2009. – 384 с.
8. Волкова, Е.А. Квантовая механика на персональном компьютере / Е.А. Волкова, А.М. Попов, А.Т. Рахимов. – М.: URSS, 1995. – 215 с.
9. Вонсовский, С.В. Квантовые флуктуации физических величин в стационарном состоянии / С.В. Вонсовский, М.С. Свирский, Л.М. Свирская // ЖЭТФ, 1981. – Т. 81. – Вып. 1(7). – С. 255–262.
10. Гейзенберг, В. Физика и философия. Часть и целое / В. Гейзенберг. – М.: Наука, Физматлит, 1990. – 400 с.
11. Давыдов, А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 704 с.
12. Демидович, Б.П. Математический аппарат квантовой механики / Б.П. Демидович. – СПб.: Лань, 2005. – 200 с.

13. Дирак, П.А.М. Принципы квантовой механики / П.А.М. Дирак. – М.: Наука, 1979. – 482 с.
14. Джеммер, М. Эволюция понятий квантовой механики / М. Джеммер. – М.: Наука, 1985. – 379 с.
15. Килин, С.Я. Квантовая информация / С.Я. Килин // УФН, 1999. – Т. 169. – № 5. – С. 507–526.
16. Коэн-Таннуджи, К. Квантовая механика / пер. с фр. Л.Н. Новикова: в 2 т. / К. Коэн-Таннуджи, Б. Диу, Ф. Лалоз. – Екатеринбург: изд-во Урал. ун-та, 2000. – Т. 1. – 944 с. – Т. 2. – 800 с.
17. Ландау, Л.Д. Курс теоретической физики. Том III. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2016. – 800 с.
18. Ландау, Л.Д. Краткий курс теоретической физики. Том 2. Квантовая механика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1972. – 368 с.
19. Левич, В.Г. Курс теоретической физики. Том II / В.Г. Левич, Ю.А. Вдовин, В.А. Мямлин. – М.: Наука, 1971. – 936 с.
20. Матвеев, А.Н. Атомная физика / А.Н. Матвеев. – М.: Мир и образование, 2007. – 432 с.
21. Манделъштам, Л.И. Лекции по основам квантовой механики (Теория косвенных измерений, 1939 г.) / Л.И. Манделъштам // Полное собрание трудов: в 5 т. – Л.: Изд-во АН СССР, 1947–1955. – Т. 5; под ред. акад. М.А. Леонтовича, 1950. – 468 с.
22. Менский, Б.М. Сознание и квантовая механика: Жизнь в параллельных мирах (Чудеса сознания – из квантовой реальности) / Б.М. Менский. – Фрязино: Век 2, 2011. – 320 с.
23. Мессиа, А. Квантовая механика: в 2 т. / А. Мессиа. – М.: Наука, Физматлит. – Т. 1. – 1978. – 478 с. – Т. 2. – 1979. – 583 с.
24. Мултановский, В.В. Курс теоретической физики. Квантовая механика / В.В. Мултановский, А.С. Василевский. – М.: Просвещение, 1991. – 320 с.
25. Пайс, А. Научная деятельность и жизнь Альберта Эйнштейна / А. Пайс. – М.: Наука, 1989. – 568 с.
26. Паули, В. Труды по квантовой теории / В. Паули. – М.: Наука, 1975. – Т. 1. – 688 с.

27. Планк, М. Избранные труды / М. Планк. – М.: Наука, 1975. – 788 с.
28. Савельев, И.В. Основы теоретической физики. Т. 2. Квантовая механика / И.В. Савельев. – М.: Наука, 1977. – 352 с.
29. Соколов, А.А. Квантовая механика / А.А. Соколов, И.М. Тернов, В.Ч. Жуковский. – М.: Наука, 1979. – 528 с.
30. Фейнман, Р. Фейнмановские лекции по физике. Т. 8–9. Квантовая механика / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. – М.: Мир, 1978. – 520 с.
31. Фейнман, Р. Квантовая механика и интегралы по траекториям / Р. Фейнман, А. Хибс. – М.: Мир, 1968. – 382 с.
32. Ферми, Э. Квантовая механика (конспект лекций) / Э. Ферми. – М.: Мир, 1965. – 368 с.
33. Фок, В.А. Начала квантовой механики / В.А. Фок. – М.: Наука, 1976. – 376 с.
34. Шпольский, Э.В. Атомная физика: в 2 т. / Э.В. Шпольский. – СПб.: Лань, 2010. – Т. 1. – 560 с. – Т. 2. – 448 с.
35. Шрёдингер, Э. Избранные труды по квантовой механике / Э. Шрёдингер. – М.: Наука, 1976. – 422 с.
36. Эйнштейн, А. Собрание научных трудов в четырех томах. Т. 3. Работы по кинетической теории, теории излучения и основам квантовой механики 1901–1955 гг. / А. Эйнштейн. – М.: Наука, 1966. – 632 с.
37. Эйнштейн, А. Собрание научных трудов в четырех томах. Т. 4. Статьи, рецензии, письма. Эволюция физики / А. Эйнштейн. – М.: Наука, 1967. – 600 с.

Учебное издание

Свирская Людмила Моисеевна

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Курс лекций

В двух частях

Часть I

ISBN 978-5-91155-062-2

ISBN 978-5-91155-063-9

Работа рекомендована РИС ЮУрГГПУ
Протокол № 15 пункт 21 от 21.12.2017

Редактор Е.М. Сапегина
Технический редактор В.В. Мусатов
Эксперт И.И. Клебанов

Издательство ЮУрГГПУ
454080, Челябинск, пр. Ленина, 69

Подписано в печать 11.09.2018
Формат 84x108/16 Объем 9,4 уч.-изд.л. (28,1 п.л.)
Тираж 100 экз. Заказ №

Отпечатано с готового оригинал-макета в типографии ЮУрГГПУ
454080, Челябинск, пр. Ленина, 69