**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«УЛЬЯНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

**Инженерно-физический факультет высоких технологий**

**Кафедра физических методов в прикладных исследованиях**

#### ***Б. М. Костишко, Ю. Ф. Наседкина, Р. В. Гурина***

**КВАНТОВАЯ ФИЗИКА**

*Учебное пособие*

**Часть 1**

Ульяновск

2021

**УДК 537**

**ББК 22.33 я73**

**К72**

*Печатается по решению Ученого совета  
инженерно-физического факультета высоких технологий  
Ульяновского государственного университета  
(протокол № 06-16/02-19-10 от 24.03.2021)*

**Рецензент –**

*Журавлев В.М.,* д.ф.-м.н., профессор кафедры теоретической   
и математической физики Ульяновского государственного университета

**Костишко Б.М.**

**К72 Квантовая физика** : учебное пособие : в 2-х ч. Ч. 1 / Б. М. Костишко, Ю. Ф. Наседкина, Р. В. Гурина. – Ульяновск : УлГУ, 2021. – 120 с.

Пособие составлено в соответствии с рабочими программами курсов «Физика» и «Специальные разделы физики» факультета ФМИАТ и включает в себя введение, восемь глав квантовой физики, а также необходимые приложения и материалы для самостоятельной работы студентов. В приложениях приведены, в том числе примеры решения задач, справочные таблицы и дополнительные материалы, задачи для самостоятельного решения.

Предназначено студентам специальностей «Компьютерная безопасность», «Информационная безопасность», «Прикладная математика», «Прикладная информатика», «Математическое обеспечение и администрирование информационных систем», «Авиастроение», «Системный анализ и управление» и других специальностей, изучающих дисциплину «Квантовая физика». Пособие призвано помочь при самостоятельном изучении курса, для подготовки к семинарским занятиям, лабораторным работам и экзамену.

УДК 537

ББК 22.33 я73

***© Костишко Б. М., Наседкина Ю. Ф., Р. В. Гурина, 2021***

***© Ульяновский государственный университет, 2021***

# Оглавление

[Введение 5](#_Toc70071010)

[Глава I. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВАНИЯ   
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ 8](#_Toc70071011)

[§ 1.1. Опыты Резерфорда и Франка-Герца 10](#_Toc70071012)

[§ 1.2. Энергетические спектры атомов 16](#_Toc70071013)

[§ 1.3. Фотоэффект. Фотон 17](#_Toc70071014)

[§ 1.4. Эффект Комптона 24](#_Toc70071015)

[§ 1.5. Волновые свойства частиц 27](#_Toc70071016)

[§ 1.6. Строение атома по Бору 31](#_Toc70071017)

[§ 1.7. Принцип неопределенности 36](#_Toc70071018)

[Глава 2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ 41](#_Toc70071019)

[§ 2.1. Вероятностное описание состояний физических систем.   
Волновая функция 41](#_Toc70071020)

[§ 2.2. Операторы 44](#_Toc70071021)

[§ 2.3. Сложение и умножение операторов 49](#_Toc70071022)

[§ 2.4. Гамильтониан 53](#_Toc70071023)

[§ 2.5. Дифференцирование операторов по времени 54](#_Toc70071024)

[§ 2.6. Стационарные состояния 55](#_Toc70071025)

[§ 2.7. Матрица 57](#_Toc70071026)

[§ 2.8. Соотношение неопределенностей в операторном представлении 58](#_Toc70071027)

[Глава 3. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА 60](#_Toc70071028)

[§ 3.1. Основные свойства уравнения Шредингера 62](#_Toc70071029)

[§ 3.2. Плотность потока 63](#_Toc70071030)

[§ 3.3. Общие свойства одномерного движения 65](#_Toc70071031)

[§ 3.4. Потенциальная яма 67](#_Toc70071032)

[§ 3.5. Конечный потенциальный барьер. Туннелирование 74](#_Toc70071033)

[§ 3.6. Инфинитное движение в поле прямоугольной   
потенциальной ямы 78](#_Toc70071034)

[§ 3.7. Гармонический осциллятор 80](#_Toc70071035)

[ЛИТЕРАТУРА 86](#_Toc70071036)

[ПРИЛОЖЕНИЯ 88](#_Toc70071037)

[Приложение 1](#_Toc70071038). [Нобелевские премии по физике и химии,   
связанные с квантовой теорией 88](#_Toc70071039)

[Приложение 2.](#_Toc70071040) [О природе фотона 94](#_Toc70071041)

[Приложение 3.](#_Toc70071042) [Каков размер фотона? Фотон как волновой цуг 99](#_Toc70071043)

Приложение 4. Примеры решения простых задач 101

Приложение 5. Приставки для образования десятичных кратных   
и дольных единиц. Основные физические константы 115

# Введение

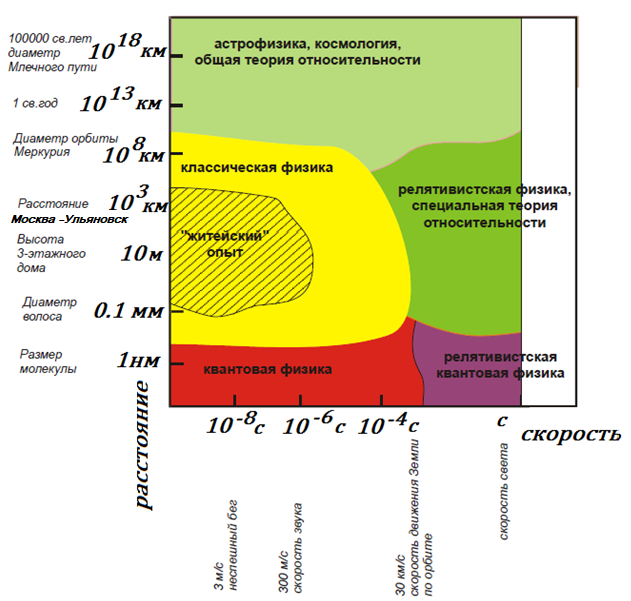
Квантовая физика описывает свойства материи на уровне микроявлений, исследуя законы движения микрообъектов.

Предмет изучения квантовой физики составляют квантовые объекты, обладающие размерами 10−8 см и меньше. Это молекулы, атомы, атомные ядра, элементарные частицы. Главные характеристики микрообъектов – масса покоя и электрический заряд. Например, масса одного электрона me равна 9,1·10−28 г. Некоторые частицы вообще не имеют массы покоя (нейтрино, фотон).

Важнейшее значение изучения квантовой физики заключается в возможности проследить, как развивается научное познание мира. На примере изучения теории электричества мы увидели, как двигалось понимания электрических явлений от простых опытов и эмпирических законов к системе уравнений Максвелла – четырёх уравнений, в которых выражаются все наши знания об электрических и магнитных явлениях. На примере квантовой теории можно увидеть, как возникает новая область научного знания – от проблем в существующей картине мира к их пониманию и объяснению, и как эта новая область связана с уже существующими областями.

Одна из психологических проблем при знакомстве с неклассическими разделами физики, в частности, квантовой физикой или теорией относительности, заключается в попытке примирить новые знания со своим повседневным опытом и житейским «здравым смыслом». Узнав о волновых свойствах объектов микромира, человек подсознательно пытается применить это новое знание к привычным объектам. В результате возникает конфликт: ведь наш опыт говорит, что мяч, книга, кошка – это вполне определённые объекты, находящиеся в определённом месте и уж точно никакими волнами в стороны не разбегающиеся.

Необходимо понять, что наш «здравый смысл» формируется в очень ограниченном пространстве параметров – это не слишком маленькие и не слишком большие предметы, двигающиеся не слишком быстро, взаимодействующие не очень сильно и не очень слабо, и так далее. Частично это можно отобразить схемой, показанной на рис. 1.



*Рис. 1.* Области изучения различных разделов физики

Схема эта весьма условна, чётких границ между различными областями физики нет – они переходят друг в друга непрерывно. Схема эта, несомненно, неполна, можно её уточнять, например, вспомнив про физику элементарных частиц. Но есть один важный вывод, ради которого и нарисована эта схема: область параметров, в которой формируется наш «житейский опыт» и «здравый смысл» очень небольшая. Поэтому нет ничего удивительного, что в условиях, далёких от привычных нам (в частности, в микромире), действуют другие законы. И применять понятия «здравого смысла» всегда надо с осторожностью, отдавая себе отчёт в том, что этот «здравый смысл» не универсален. Более того, можно сказать, что квантовая физика – это более общая теория, чем физика классическая.

Многое в природе невозможно вообразить, опираясь лишь на наш повседневный опыт, однако можно понять и объяснить. И в этом заключается одно из величайших достижений научного познания мира, одно из величайших достижений человеческого разума: мы можем понять то, чего не можем представить.

Отметим также, что квантовая физика является важной составляющей научной картины мира, она тесно связана с другими областями физики: физика твёрдого тела – это во многом квантовая физика, явления сверхтекучести и сверхпроводимости – это квантовые явления, вопросы строения материи и взаимодействия излучения с веществом не могут быть поняты во всей полноте без методов квантовой физики. В качестве объективной оценки роли квантовой физики можно рассмотреть список Нобелевских премий по физике[[1]](#footnote-1) и химии[[2]](#footnote-2) – и мы увидим, что за открытия, связанные с квантовой физикой, присуждена заметная часть премий (см. Приложение 1).

Квантовая теория, как мы видим по этому перечислению достижений, объяснила многие явления природы. Она является признанной и многократно подтверждённой теорией.

# Глава I. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВАНИЯ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

Из-за малых () размеров отдельные атомы увидеть нельзя. Информацию о строении атомов можно получить лишь косвенным способом. Например, исследуя их реакции на различные физические воздействия. Такие воздействия подразделяются на три большие группы:

1) нагрев – при этом усиливается беспорядочное тепловое движение атомов;

2) облучение электромагнитными волнами разных частот (свет, рентгеновское и гамма-излучение);

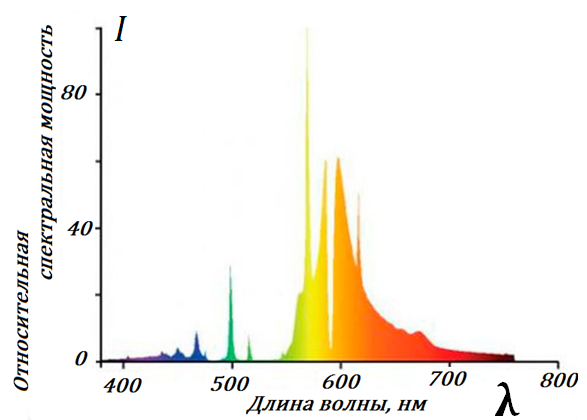
3) бомбардировка микрочастицами (электронами , -частицами , нейтронами *n*, ионами металлов и т.д.).

В каждом из этих случаев реакция атомов состоит в испускании частиц и электромагнитного излучения. Поскольку в ряде экспериментов при столкновении атомов происходит испускание электронов , можно сделать закономерный вывод, что атомы содержат электроны. Испускание электромагнитных волн атомами говорит о том, что в атомах неравномерно движутся заряженные частицы.

Рассмотрим, какую информацию можно получить, исследуя излучение вещества (или обратный процесс – поглощение электромагнитного излучения веществом). Спектры, полученные от самосветящихся тел, называют спектрами испускания. Непосредственные наблюдения и фотографии спектров показывают, что спектры испускания могут быть трех типов: сплошные, линейчатые и полосатые.

**Сплошные** спектры получаются от твердых и жидких тел в результате их нагревания.

Неожиданно оказалось, что спектр испускания идеального газа, а это, как вы знаете, агрегатное состояние, в котором атомы взаимодействуют друг с другом только упругими соударениями, т.е. «не чувствуют» друг друга, – так вот, их спектры не являются непрерывными – они дискретны или **линейчаты**. Линейчатые спектры, состоят из узких линий различных цветов, разделенных темными промежутками. Изучение линейчатых спектров различных веществ показало, что каждый химический элемент дает свой линейчатый спектр, не совпадающий со спектрами других элементов. Линейчатые спектры химических элементов отличаются цветом, положением и числом отдельных светящихся линий. Характерные для каждого химического элемента линии получаются не только в видимой, но также и в инфракрасной и в ультрафиолетовой частях спектра. Исследование линейчатых спектров впервые было выполнено в 1854-1859 гг. немецкими учеными Г. Кирхгофом и Р. Бунзеном. Линейчатые спектры создаются излучением отдельных атомов, не связанных в молекулы. Это излучение вызвано процессами, происходящими внутри атомов. Исследование линейчатых спектров позволило установить строение электронных оболочек атомов различных химических элементов.



*Рис. 1.1.* Пики спектра испускания паров натрия

Пики зависимости I () назвали спектральными линиями.

Линейчатые спектры имеют следующие свойства:

1) для одного и того же химического элемента положение спектральных линий одинаково и не зависит от температуры T;

2) интенсивность линий является функцией температуры I () = ;

3) расположение спектральных линий различных элементов отличаются;

4) если атомы соединяются в молекулы, спектральные линии сдвигаются;

5) при переходе газа в жидкое состояние линейчатые спектры превращаются в непрерывные (см. рис. 1.1).

Свойства 1) и 3) не описываются в рамках классической (неквантовой) физики. Действительно, если электрон двигается в атоме с переменной скоростью – это необходимо для того, чтобы он начал излучать – то совершенно непонятно, почему излучение происходит только на определенных частотах, а не непрерывно.

**Полосатые** спектры состоят из ряда светлых полос, разделенных темными промежутками, они создаются излучением молекул. При рассмотрении в спектроскоп с большой разрешающей способностью полосы разделяются на ряд линий.

## § 1.1. Опыты Резерфорда и Франка-Герца

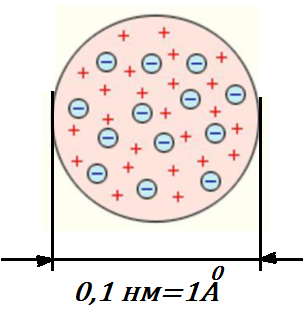
В 1911-1913 гг. были выполнены два опыта, которые сыграли фундаментальную роль в определении структуры атома и развитии квантовой теории.

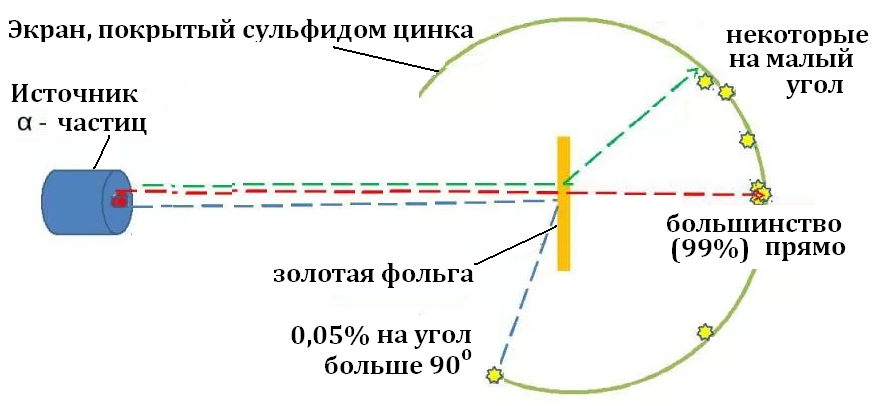
В 90-х годах XIX века получила широкое распространение модель атома Томсона в виде однородной положительной сферической среды, в которой, как изюминки в булке, рассредоточены отрицательно заряженные электроны. Суммарное количество положительных и отрицательных зарядов равна нулю, +Q = -Q и атом электронейтрален. Атомная модель Томсона подобна кексу (см. рис. 1.2). Однако вскоре автор «кексовой» модели высказал предположение о нестатическом положении электронов в атоме.

Но в 1912 году Резерфорд провел опыт по облучению очень тонкой фольги золота -частицами – ядрами атома гелия . Золото было выбрано потому, что его можно раскатывать в очень тонкую фольгу толщиной ~400 монослоёв. За фольгой находился экран, покрытый сцинтиллятором – веществом, которое испускает (или испускающим) свет в той точке, в которую ударялась α-частица.

Если использовать быстрые   
-частицы (у Резерфорда энергия час­тиц составляла 5 МeV, соответствен­но, скорость порядка ), то при  
пролёте через фольгу они испытывают   
только однократное столкновение и   
при этом глубоко проникают в атом.   
Исходя из модели Томсона, следовало   
ожидать, что α-частицы не будут   
отклоняться на большие углы, так как электроны гораздо легче α-частиц.   
И, действительно, опыты показали, что   
большинство α-частиц свободно про­ходило сквозь лист фольги, как если бы он представлял собой в основном пустое пространство. Часть α-частиц отклонялась на небольшие углы, причиной чего было взаимодействие с положительным зарядом атома. Но неожиданным и ошеломляющим оказалось то, что небольшое количество   
α-частиц рассеивалось на большие углы, достигающие 180°. Такое могло происходить только в том случае, если положительно заряженные   
α-частицы испытали отталкивание массивного положительного заряда, сконцентрированного в малой области пространства (рис. 1.3).

*Рис. 1.2.* Модель Томсона





*Рис. 1.3.* Схема опыта Резерфорда

|  |  |
| --- | --- |
| http://www.karelia.ru/psu/Chairs/KOF/abitur/images/theory/atom/rezerford%20.jpg  *Рис. 1.4.* Опыт Резерфорда.  1 – ядро атома золота ; 2 – частицы | По словам Резерфорда, это все равно, что пятнадцатидюймовый снаряд отлетел бы от папиросной бумаги (рис. 1.4).  Объяснение такому поведению α-частицы могло быть только одно: атом практически «пустой», а вся масса атома сосредоточена в небольшом объеме (по оценкам, м) – ядре, а столкновение с личным электроном, естественно, не в состоянии отклонить -час­тицу от начальной траектории. |

Согласно модели Э. Резерфорда атом состоит из массивного, положительно заряженного ядра, в котором сосредоточено 99,94 % массы атома. Величина положительного заряда оценивается произведением ze, где z – порядковый атомный номер химического элемента в таблице Менделеева;   
е – элементарный заряд. Вокруг ядра внутри сферы с наружным диаметром ~10-10м по замкнутым эллиптическим орбитам вращается z электронов, образуя электронную оболочку атома. Электроны не могут покоиться в атоме, так как в этом случае они упали бы на ядро под действием кулоновского притяжения. По оценкам Э. Резерфорда, размеры ядра должны быть порядка 10-15–10-14 м. Сравнивая размеры ядра и атома, приходим к выводу о том, что электроны должны находиться от ядра на расстоянии в 104–105 больше, чем размер ядра. И отсюда второй вывод: основную часть атома составляет пустое пространство.

Недостаток модели Э. Резерфорда состоит в невозможности объяснить факт исключительной устойчивости атома: во-первых, при столкновениях с другими атомами; во-вторых, по законам классической физики вращение электронов вокруг ядра не может быть устойчивым, так как оно должно сопровождаться электромагнитным излучением, как всякое ускоренное движение заряженных частиц. По законам классической физики электроны, двигаясь по окружности, обладают центростремительным ускорением. Центростремительная, сила, удерживающая электрон на орбите радиусом *r*, представляет кулоновскую силу притяжения электрона к ядру:

,

где εо = 8,85·10-12Ф/м – электрическая постоянная; ;   
v – скорость электрона на орбите. На создание электромагнитного поля расходуется энергия. Энергия электрона должна постепенно убывать, а вместе с ней и скорость вращения электрона вокруг ядра. Электрон в конце концов должен упасть на ядро. Однако атомы – достаточно устойчивые образования и могут существовать миллиарды лет. В-третьих, согласно модели Э. Резерфорда, спектр излучения атома должен быть сплошным. Опыты же показали, что спектр излучения конкретного атома является дискретным.

Еще один фундаментальный эксперимент был проведен Франком и Герцем в 1913 году. Они взяли колбу, заполненную парами ртути при давлении *p=*1 мм рт. ст.Идея опытов заключается в следующем. При неупругих столкновениях электрона с атомом происходит передача энергии от электрона атому. Если внутренняя энергия атома изменяется непрерывно, то атому может быть передана любая порция энергии. Если же состояния атома дискретны, то его внутренняя энергия при столкновении с электроном должна изменяться так же дискретно – на значения, равные разности внутренней энергии атома в стационарных состояниях.

Между сеткой и анодом прикладывалась небольшое тормозящее напряжение 0.5 В, затем определялась вольт-амперная характеристика этой колбы. Из неквантовых соображений кажется, что ток должен монотонно возрастать с напряжением. Но оказалось, что сила тока I осциллирует с ростом напряжения V.

Принципиальная схема установки, примененной Франком и Герцем, представлена на рис. 1.5.

|  |  |
| --- | --- |
|  | Следовательно, при неупругом столкновении электрон может передать атому лишь определенные порции энергии. Измеряя их, можно определить значения внутренних энергий стационарных состояний атома. |
| *Рис. 1.5.* Схема установки Франка и Герца |

В баллоне с парами ртути под давлением порядка 1 мм рт. ст. (≈130 Па) имелись три электрода: *К* – катод, *С* – сетка и *А* – анод. Электроны, испускаемые горячим катодом вследствие термоэлектронной эмиссии, ускорялись разностью потенциалов *U* между катодом и сеткой. Величину *U* можно было плавно менять. Между сеткой и анодом создавалось слабое тормозящее поле с разностью потенциалов около 0,5 В.

|  |
| --- |
|  |
| *Рис. 1.6.* Вольт-амперная характеристика  триода для *Hg* в опыте Франка и Герца |

Таким образом, если электрон, проходящий сквозь сетку, имеет энергию меньше 0,5 эВ, то он не долетит до анода. Электроны, долетевшие до анода, образуют анодный ток, доступный измерению.

На опыте исследовалась вольт-амперная характерис­тика (рис. 1.6). Оказалось, что при увеличении ускоряющей разности потенциалов *U* вплоть до 4,86 В сила анодного тока возрастает монотонно, прохо­дит через максимум (4,86 В), затем резко падает и возрастает вновь. Дальнейшие максимумы наблюдаются при 2·4,86=9.72 В, 3·4,86=14.58 В и т.д.

Такой вид кривой объясняется тем, что первое возбужденное состояние атома ртути отстоит от основного по шкале энергий на  эВ, и атомы, действительно, могут поглощать лишь дискретные порции энергии, равные этой величине. При энергии электронов, меньшей 4,86 эВ, они испытывают только *упругие* столкновения и передают атомам малую часть своей энергии (пропорциональную отношению массы электрона *m* к массе атома *M*, а так как *m* << *M*, то потеря кинетической энергии ничтожна). Когда же ускоряющее напряжение *U* становится равным 4,86 В, электроны начинают испытывать вблизи сетки *неупругие* столкновения, отдавая атому ртути всю энергию, и уже не могут преодолеть тормозящую разность потенциалов между сеткой и анодом. Значит на анод могут попасть только те электроны, которые не испытали неупругого столкновения. Поэтому, начиная с ускоряющего напряжения 4,86 В, анодный ток будет уменьшаться.

При дальнейшем росте ускоряющего напряжения достаточное число электронов после неупругого столкновения успевает приобрести энергию, необходимую для преодоления тормозящего поля за сеткой. Начинается новое возрастание силы тока. Когда ускоряющее напряжение увеличится до значения 2·4,86 В=9.72 В, электроны после одного неупругого столкновения достигают сетки с энергией 4,86 эВ, достаточной для второго неупругого столкновения. При втором неупругом столкновении электроны опять теряют почти всю свою энергию и не достигают анода. Поэтому анодный ток начинает опять уменьшаться (второй максимум на рис. 1.6). Аналогично объясняются и последующие максимумы. Практически, однако, следующие максимумы менее резко выражены и постепенно кривая становится просто плавно возрастающей, так как статистически для одного электрона вероятность испытать каждое следующее неупругое столкновение с атомом уменьшается.

Аналогичные опыты были проведены в дальнейшем с атомами других газов (табл. 1.1). И для них были получены характерные разности потенциалов, соответствующие переходу атома из основного состояния в ближайшее возбужденное. Такие характерные разности потенциалов называют *первыми потенциалами возбуждения*.

*Таблица 1.1.* Значения потенциалов возбуждения газов

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Элемент | *He* | *Ne* | *Ar* | *Kr* | *Xe* | *Hg* | *Na* | *K* | *Cs* |
| *Uвозб,* В | 20,9 | 16,6 | 11,6 | 10,0 | 8,5 | 4,9 | 2,1 | 1,6 | 1,4 |

Итак, все опыты такого рода приводят к заключению, что состояние атомов изменяются лишь дискретно. Это означает, что при определенных ускоряющих напряжениях электроны почти полностью отдают энергию атомам ртути и не могут преодолеть запирающее напряжение. Результаты опытов Франка и Герца указывают на то, что в атомах электроны поглощают энергию строго определенными порциями. Это также необъяснимо законами классической физики.

Стало понятно, что объяснение явлений, происходящих на микроуровне (атомном), требует создания новой физической (неклассической) теории.

## § 1.2. Энергетические спектры атомов

Спектры испускания и поглощения атомов имеют очень много линий, которые, на первый взгляд, расположены в свободном порядке. Однако в результате кропотливой работы И. Бальмеру, Ю.Р. Рибергу, Т. Лайману, Ф. Пашену и другим исследователям удалось установить ряд важных закономерностей.

Например, для атома водорода частоты линии испускания (или поглощения) подчиняются простой формуле:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| , |  | (1.1) |

где – постоянная Ридберга; ;   
 В частности, если , а

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (1.2) |

и можно изобразить графически в долях постоянной Ридберга.

Формула (1.1) представима в виде

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (1.3) |

Это означает, что каждая спектральная частота атома водорода выражается разностью из набора (1.2). Позднее выяснилось, что (1.2) справедливо только для водорода. А вот (1.3) справедливо для спектров всех атомов. Поэтому был сформулирован **комбинационный принцип Ритца**: для спектра испускания или поглощения атомов можно подобрать такой набор частот что частота каждой спектральной линии оказывается разностью двух частот из этого набора (базиса).

Из принципа Ритца следуют простые связи . Физический смысл величин ,   
которые назвали **спектральными нормами**, долгое время оставался неясным, их понимание пришло с открытием квантовой механики, вернее, с закреплением в сознании новых описательных законов микромира.

## § 1.3. Фотоэффект. Фотон

Фотоэффектом называется вырывание электронов из вещества под действием электромагнитного излучения.

Фотоэлектрический эффект был открыт в 1887 г. немецким физиком Г. Герцем и в 1888-1890 гг. экспериментально исследован А.Г. Столетовым. Наиболее полное исследование явления фотоэффекта было выполнено Ф. Ленардом в 1900 г. К этому времени уже был открыт электрон (1897 г., Дж. Томсон) и стала ясна суть явления внешнего фотоэффекта.

Возьмем вакуумную колбу и создадим между пластинами разность потенциалов, как показано на рис. 1.7. Без облучения светом ток отсутствует. При освещении катода происходит фотоэффект, появляются свободные носители заряда и возникает ток.

|  |  |
| --- | --- |
| http://www.physbook.ru/images/a/a7/Img_fotoeffect-001.jpg  *Рис. 1.7.* Установка для наблюдения  фотоэффекта | В экспериментах Столетова ис­пользовался стеклянный вакуум­ный баллон с двумя металличес­кими электродами, поверхность которых была тщательно очищена (рис. 1.7). К электродам приклады­валось некоторое напряжение U, полярность которого можно было изменять с помощью двойного ключа. Один из электродов (катод K) через кварцевое окошко осве­щался монохроматическим светом некоторой длины волны λ. При не­изменном световом потоке снима­лась зависимость силы фототока I от приложенного напряжения. |

На рис. 1.8*а* изображены типичные кривые такой зависимости, полученные при двух значениях интенсивности светового потока, падающего на катод. По мере увеличения напряжения U фототок постепенно возрастает, т.е. все большее количество фотоэлектронов достигает анода. Пологий характер кривых показывает, что электроны вылетают из катода с различными скоростями. Максимальное значение тока Iнас – фототок насыщения – определяется таким значением U, при котором все электроны, испускаемые катодом, достигают анода: Iнас. = en, где n – число электронов, испускаемых катодом в одну секунду, e – заряд электрона.

Весьма странным является то, что ток прекращается при определенном запирающем напряжении U0 независимо от интенсивности света. Иными словами, кинетическая энергия отдельно взятого электрона строго фиксирована. Неожиданным оказалось то, что эта энергия не зависит от интенсивности света, если частота не изменяется. А ведь согласно классической теории, интенсивность света пропорциональна квадрату напряженности поля волны и, следовательно, чем больше I, тем большую энергию должны получать вырываемые из металла электроны.

|  |  |
| --- | --- |
|  | |
| *Рис. 1.8а.* Вольт-амперная характеристика  фотоэлемента | *Рис. 1.8б.* Зависимость фототока  от интенсивности света |

Зависимость фототока от интенсивности света при его неизменном спектральном составе (рис. 1.8.б) вполне укладывается в классические представления о частицах. Столетовым были установлены три закона:

1. При фиксированной частоте ν падающего света число фотоэлектронов, вырываемых из катода в единицу времени, пропорционально интенсивности света (сила фототока насыщения пропорциональна энергетической освещённости Ee катода).
2. Максимальная начальная скорость (максимальная начальная кинетическая энергия ) фотоэлектронов не зависит от интенсивности падающего света, а определяется только его частотой ν.
3. Для каждого вещества существует **красная граница фотоэффекта**, т.е. минимальная частота света (зависящая от химической природы вещества и состояния его поверхности), ниже которой фотоэффект невозможен.

Тщательные измерения показали, что ток насыщения Iнас прямо пропорционален интенсивности падающего света. При этом величины и зависят от частоты света и становятся равной нулю при частоте , как показано на рис. 1.9.

Как можно было бы объяснить фотоэффект с точки зрения классической электродинамики и волновых представлений о свете? Известно, что для вырывания электрона из вещества требуется сообщить ему некоторую энергию A, называемую работой выхода электрона. В случае свободного электрона в металле – это работа по преодолению поля положительных ионов кристаллической решётки, удерживающего электрон на границе металла. В случае электрона, находящегося в изолированном атоме, работа выхода есть работа по разрыву связи электрона с ядром.

|  |
| --- |
| *Рис. 1.9.* Зависимость запирающего напряжения от частоты |

В переменном электрическом поле световой волны электрон начинает совершать колебания. И если энергия колебаний превысит работу выхода, то электрон будет вырван из вещества.

Однако в рамках таких представлений невозможно понять второй и третий законы фотоэффекта. Действительно, почему кинетическая энергия выбитых электронов не зависит от интенсивности излучения? Ведь чем больше интенсивность, тем больше напряжённость электрического поля в электромагнитной волне, тем больше сила, действующая на электрон, тем больше энергия его колебаний и с тем большей кинетической энергией электрон вылетит из катода. Но эксперимент показывает иное.

Откуда берётся красная граница фотоэффекта? Чем «плохи» низкие частоты? Казалось бы, чем больше интенсивность света, тем больше сила, действующая на электроны; поэтому даже при низкой частоте света электрон рано или поздно будет вырван из вещества – когда интенсивность достигнет достаточно большого значения.

Ведь с точки зрения классической теории, чем выше частота, тем меньше кинетическая энергия электронов. Докажем это. Уравнение   
движения электрона под действием переменного электрического поля имеет вид

*.*

Проинтегрируем левую и правую части этого соотношения и запишем кинетическую энергию электрона:

.

.

Таким образом, с увеличением частоты должна уменьшаться обратно пропорционально квадрату частоты, а не возрастать. Однако красная граница ставит жёсткий запрет на вылет электронов при низких частотах падающего излучения.

Кроме того, непонятна безынерционность фотоэффекта. При освещении катода излучением сколь угодно слабой интенсивности (с частотой выше красной границы) фотоэффект начинается мгновенно – в момент включения освещения. Между тем, казалось бы, электронам требуется некоторое время для «расшатывания» связей, удерживающих их в веществе, и это время «раскачки» должно быть тем больше, чем слабее падающий свет. Аналогия такая: чем слабее вы толкаете качели, тем дольше придётся их раскачивать до заданной амплитуды. Выглядит логично, но опыт – единственный критерий истины в физике! – этим доводам противоречит. Так на рубеже XIX и XX столетий в физике возникла тупиковая ситуация: электродинамика, предсказавшая существование электромагнитных волн и великолепно работающая в диапазоне радиоволн, отказалась объяснять явление фотоэффекта.

Выход из этого тупика был найден Альбертом Эйнштейном в 1905 г. Он нашёл простое уравнение, описывающее фотоэффект. Все три закона фотоэффекта оказались следствиями уравнения Эйнштейна. Главная   
заслуга Эйнштейна состояла в отказе от попыток истолковать фотоэффект с позиций классической электродинамики. Эйнштейн привлёк к делу   
**гипотезу о квантах**, высказанную Максом Планком пятью годами ранее.

Электромагнитная энергия излучается и поглощается ненепрерывно, а дискретно отдельными порциями – квантами. Энергия кванта пропорциональна частоте излучения:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| , |  | (1.4) |

Cоотношение (1.4) называется формулой Планка, а коэффициент пропорциональности h – постоянной Планка. Успешность гипотезы Планка наводила на мысль, что законы классической физики неприменимы к малым частицам вроде атомов или электронов, а также к явлениям взаимодействия света и вещества. Подтверждением данной мысли как раз и послужило явление фотоэффекта.

### 1.3.1. Теория Планка

Соотношение (1.4) было впервые введено Планком для объяснения спектров испускания нагретых тел. История этого открытия такова. С помощью соотношений термодинамики в конце XIX века было установлено, что распределение энергии в спектре излучения, находящегося в тепловом равновесии с веществом, не зависит от рода вещества. Поэтому для точных расчетов стали заменятьвещество гипотетической средой, состоящей из набора заряженных гармонических осцилляторов.

Однако такие расчеты привели к абсурдному результату. Оказалось, что энергия излучения пропорциональна квадрату его частоты. А это означает, что тепловое равновесие между излучением и телом вообще невозможно, поскольку интеграл по частоте, равный полной энергии излучения, расходится, т.е. стремится к бесконечно большим значениям. Макс Планк показал, что эту так называемую «ультрафиолетовую катастрофу» в теории можно устранить и добиться согласия с экспериментом, если допустить, что энергия излучателя – осциллятора принимает только дискретные значения, кратные частоте этого осциллятора. Из этого закона и закона сохранения энергии следовало, что излучение происходит порциями – квантами, энергия которых пропорциональна частоте излучения (1.4). Коэффициент пропорциональности, названный постоянной Планка, был найден из условия совпадения расчётных и опытных данных.

Формула Планка описывает плотность энергии излучения в единице объема:

(1.5а)

где – плотность энергии, приходящаяся на единичный интервал энергии.

|  |  |
| --- | --- |
| *Рис. 1.9.* График функции Планка | С учетом соотношения (1.4) можно переписать (1.5а) в виде  (1.5б)  где – плотность энергии, приходящаяся на единицу частотного интервала, . |

Функция представляет собой кривую с максимумом на некоторой частоте (рис. 1.9). Спад при увеличении частоты , который и устраняет ультрафиолетовую катастрофу, связан с нарушением закона равного распределения энергии по степеням свободы, принятого в классической физике. Плотность уровней энергии, разрешённых в твердом теле g(), уменьшается с ростом частоты, поэтому и вероятность излучения в этом диапазоне убывает по закону .

Гипотеза Планка говорила о дискретности излучения и поглощения электромагнитных волн, т.е. о прерывистом характере взаимодействия света с веществом. При этом Планк считал, что распространение света – это непрерывный процесс, происходящий в полном соответствии с законами классической электродинамики. Эйнштейн пошёл ещё дальше: он предположил, что свет в принципе обладает прерывистой структурой: не только излучение и поглощение, но также и распространение света происходит отдельными порциями – **квантами,** обладающими энергией , , . Планк рассматривал свою гипотезу лишь как математический трюк и не решился опровергнуть электродинамику применительно к микромиру. Кванты электромагнитного излучения, в частности, кванты света, стали впоследствии называться **фотонами**. Таким образом, свет состоит из особых частиц – фотонов, движущихся в вакууме со скоростью света c. Каждый фотон монохроматического света, имеющего частоту ν, несёт энергию hν. Фотоны могут обмениваться энергией и импульсом с частицами вещества – в таком случае мы говорим о столкновении фотона и частицы. В частности, происходит столкновение фотонов с электронами металла катода. Поглощение света – это поглощение фотонов, т.е. неупругое столкновение фотонов с частицами (атомами, электронами). Поглощаясь при столкновении с электроном, фотон передаёт ему свою энергию. В результате электрон получает кинетическую энергию мгновенно, а не постепенно, и этим объясняется безынерционность фотоэффекта.

Если энергия поглощается квантами, то есть возможность объяснить зависимость *i*(*U*) и () на рис. 1.8. Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта есть не что иное, как закон сохранения энергии. На что идёт энергия фотона hν при его неупругом столкновении с электроном? Она расходуется на совершение работы выхода A по извлечению электрона из вещества и на придание электрону кинетической энергии:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| . |  | (1.6) |

Слагаемое mv2/2 имеет смысл максимальной кинетической энергией фотоэлектронов. Почему максимальной? Электроны в металле могут быть свободными и связанными. Свободные электроны «гуляют» по всему металлу, связанные электроны «сидят» внутри своих атомов. Кроме того, электрон может находиться как вблизи поверхности металла, так и в его глубине. Ясно, что максимальной кинетическая энергия фотоэлектрона будет в том случае, когда фотон попадёт на свободный электрон в поверхностном слое металла – тогда для выбивания электрона достаточно одной лишь работы выхода. Во всех других случаях придётся затрачивать дополнительную энергию – на вырывание связанного электрона из атома или на «протаскивание» глубинного электрона к поверхности. Эти лишние затраты приведут к тому, что кинетическая энергия вылетевшего электрона окажется меньше.

Энергия квантовых частиц часто измеряется во внесистемных единицах – электронвольтах.

1 электронвольт (эВ) = 1.6·10-19 Дж.

Красной границей фотоэффекта называется минимальная частота излучения, при которой всё ещё наблюдается фотоэффект

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| . |  | (1.7) |

### Замечание

Минимальное значение работы выхода в металлах А= 2 эВ = 3.2· эрг. Поэтому фотоэффект в металле возможен на частотах более

= ≈ 0.5· Гц.

Этим частотам соответствует длина волны λ< 600 нм.

## § 1.4. Эффект Комптона

Эффект Комптона – упругое рассеяние монохроматического электромагнитного излучения на свободных электронах, сопровождающееся увеличением длины волны (рис. 1.10). Впервые он наблюдался Комптоном при рассеянии рентгеновских лучей с длиной волны λ= 1Å в 1923 г. За проведенные эксперименты и истолкование их результатов в 1927 г. американский физик Артур Комптон был удостоен Нобелевской премии.

Когда волны отражаются или претерпевают дифракцию на препятствиях, их длина волны и частота остаются неизменными. Это следует из классической теории Джозефа Джона Томсона, в соответствии с которой под действием периодического электрического поля световой волны электроны вещества колеблются с частотой поля и, вследствие этого, излучают вторичные (рассеянные) волны той же частоты. Поэтому опыт Комптона, показавший, что у рентгеновских лучей, рассеянных атомами, наряду с первоначальной частотой ω обнаруживается новая частота ω'=ω-Δω, вызвал немалое удивление. Такое рассеяние со сдвигом частоты (или длины волны *λ*) называется эффектом Комптона. Более строго под эффектом Комптона понимается явление, сопровождающее рассеяние электромагнитного излучения на свободных (слабосвязанных) электронах атома, приводящее к изменению его частоты и длины волны. Поскольку величина Δ*ω* (или Δ*λ*) весьма мала, эффект Комптона экспериментально наблюдается только для коротковолновых излучений – рентгеновских (10-8 >λ> 10−12 [м](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9C%D0%B5%D1%82%D1%80)) или гамма-лучей (λ<10-11 [м](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9C%D0%B5%D1%82%D1%80)), для которых относительное изменение частоты оказывается существенным. Результаты этого опыта можно объяснить, только предположив, что электромагнитное излучение, представляющее собой поток фотонов, проявляет и волновые, и корпускулярные свойства. Фотоны обладают импульсом, и их взаимодействие с электронами вещества происходит подобно сталкивающимся шарам по законам абсолютно упругого соударения.

Формула Комптона, определяющая изменение длины волны рассеянного излучения, имеет вид

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| , |  | (1.8) |

где λ и  – соответственно, длины волн до и после рассеяния; θ *–* угол рассеяния; Λ – так называемая комптоновская длина волны электрона,   
Λ = 2,4·10-12 м.

|  |
| --- |
| *Рис. 1.10.* Схема для изучения эффекта Комптона |

То, что сдвиг  не зависит от вещества, говорит о рассеянии рентгеновского излучения на свободных или почти свободных электронах. С точки зрения классической физики, электромагнитная волна «раскачивает» электрон, который должен начать излучать с той же частотой и длиной волны. А вот если представить рентгеновское излучение в виде квантов, взаимодействующих с электронами, то можно применить законы сохранения энергии и импульса, как показано на рис. 1.11. До столкновения электрон покоится. Его импульс *ре =* 0*.* После столкновения электрон отдачи имеет импульс ;  и  – импульс налетающего и рассеянного фотонов;  – угол рассеяния фотона; φ – угол, под которым летит электрон отдачи относительно направления падающего фотона (угол отдачи).

В рентгеновском диапазоне длин волн и для гамма-излучения энергия фотонов соизмерима с собственной энергией электрона . Так как при рассеянии фотонов такой высокой энергии электрон может приобрести значительную кинетическую энергию, при рассмотрении эффекта Комптона необходимо использовать законы релятивистской механики.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| *Рис. 1.11.* Схема комптоновского рассеяния | Если  и  – энергия фо­тона, а  и  – энергии электрона, соответствен­но, до и после столкновения, то исходная система уравнений, опи­сывающих упругое столкновение фотона со свободным электроном, включает закон сохранения энер­гии | |
| или , | |

где , и закон сохранения импульса (рис. 1.11)

|  |
| --- |
| или , |

где , . Для фотона как частицы с нулевой массой покоя энергия и импульс связаны соотношением . Тогда закон сохранения энергии примет вид

|  |
| --- |
| . |

Запишем закон сохранения импульса в проекциях на оси OX и OY:

,

sin sin φ.

Следовательно, согласно теореме косинусов,

|  |
| --- |
| . |

Возведем в квадрат левую и правую часть закона сохранения энергии:

|  |
| --- |
| . |

Упрощая получившееся выражение, запишем

, или

.

Тогда, подставляя  и , имеем

.

То есть теоретические и экспериментальные значения совпадают. Величина называется комптоновской длиной волны электрона. Итак, квантовая теория излучения хорошо описывает эффект Комптона.

## § 1.5. Волновые свойства частиц

В эффекте Комптона проявляются квантовые свойства излучения. В частности, как мы увидели, взаимодействие излучения с веществом описывается языком, похожим на язык обычной механики. Квант излучения рассматривается как объект с определёнными энергией и импульсом, и процесс рассеяния рассматривается исключительно в рамках решения уравнений, возникающих из законов сохранения энергии и импульса.

Де Бройль в своей работе 1923 года «Волны и кванты»[[3]](#footnote-3) предположил существование некоторых волновых свойств у «нормальных» тел, движение которых описывалось ранее только классической механикой. Таким образом, по гипотезе де Бройля, движение материального тела может быть описано как движение некоторого волнового пакета с характерной длиной волны λ=h/p.

Одно из удивительных следствий гипотезы де Бройля – это предсказание о возможности дифракционных и интерференционных явлений в мире микрочастиц. Чтобы понять, о каких по величине эффектах идёт речь, рассмотрим наиболее удобную в обращении частицу – электрон. Удобство здесь заключается в том, что электрон, даже при технике 20-30-х годов XX века, достаточно легко получить и контролируемо ускорить.

Оценим дебройлевскую длину волны для электрона, прошедшего разность потенциалов 100 кВ:

.

Как мы помним из физики, дифракционные явления проявляются, когда период дифракционной решётки оказывается достаточно близок к длине волны. Наблюдение больших порядков интерференции всегда сопряжено с техническими сложностями. Поэтому для проверки этого следствия теории де Бройля необходимо найти подходящую дифракционную решётку. Такую решётку природа предоставляет сама в виде многочисленных кристаллов – типичное расстояние между атомами в кристалле составляет несколько ангстрем, периодическое расположение атомов соответствует всем требованиям оптики к дифракционной решётке. Поэтому искать следы дифракции естественно при рассеянии частиц на кристаллах.

В 1927 году Дэвиссон и Джермер отчётливо обнаружили волновые свойства частиц. В этих опытах наблюдалась дифракция электронов при рассеянии от кристалла никеля. Оказалось, что в полярных координатах угловая зависимость интенсивности рассеянного кристаллом электронного пучка {\displaystyle \ 0<\theta <90^{o},} имеет чёткий максимум (рис. 12 *а*).

|  |  |
| --- | --- |
|  | *Рис. 1.12 а.* Опыт Дэвиссона и Джермера (слева – схема опыта,  справа – полученная зависимость) |

А вот если зафиксировать полярный угол и изменять напряжение, получается набор максимумов, эквидистантно удаленных в осях . Кривые, наблюдаемые при рассеивании электронов, оказались полностью аналогичны рассеянию X-лучей (рис.12 б).

|  |
| --- |
| *Рис. 1.12 б.* Зависимость интенсивности рассеянного пучка электронов от его энергии. Угол рассеяния предполагается неизменным |

Опыты Девиссона и Джермера произвели огромное впечатление на физиков. После них стало совершенно ясно, что классическим частицам также присущи волновые свойства. Однако то же самое еще в 1923 году утверждал де Бройль. Действительно, связь между энергией, частотой и импульсом фотона запишем как

, .

И если ввести понятие **волнового вектора** , модуль которого равен

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (1.9) |

а направление совпадает с направлением распространения волны, тогда

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| . |  | (1.10) |

Де Бройль предположил, что условие (1.10) распространяется на все частицы. Согласно (1.10) длина волны частицы, движущейся с импульсом р

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| . |  | (1.11) |

В опыте Джермера и Дэвиссона энергия электронов составляет десятки электронвольт и, согласно (1.11), отвечающая этим значениям длина волны равна . Рентгеновские лучи имеют такой же порядок длины волны, что и обусловило похожесть спектров рассеяния. Таким образом, и фотоны, и все микрочастицы обладают в равной степени волновыми и корпускулярными свойствами. Кстати, при увеличении энергии электрона до 1 ГэВ его длина волны уменьшается до см (). Волновые свойства таких электронов не проявляются при рассеянии на кристалле, поскольку при этом длина волны сравнима с размерами атомов и расстоянием между атомными плоскостями d>>. Однако такие электроны могут дифрагировать на ядрах атомов.

Дуализм частиц был весьма фантастичен. Даже Эйнштейн написал Бору: «Прочти диссертацию де Бройля. Хотя и кажется, что писал её сумасшедший, написана она солидно!»

Почему же мы с вами в жизни не наблюдаем волновые свойства материальных частиц? Прикинем, какая длина волны де Бройля у камня (m=1 г), летящего с =10м/с: ≈7·. Ни один прибор сейчас не в состоянии зафиксировать расстояния менее , а следовательно, слишком мала, чтобы её заметить. Понятно, что с точки зрения математики квантовые свойства существуют только благодаря отличию от нуля.

Поэтому **квантовая физика содержит классическую как предел, который формально достигается при →0.** В этом случаедебройлевская длина волны →0, и приходим к классической частице – не волне.

Более точно «волновой смысл частицы мы определим позднее, а сейчас несколько вводных замечаний. Примерно в те же 30-е годы был проведён эксперимент (Биберман, Сушкин, Фабрикант) по рассеянию единичных электронов через тонкую металлическую пластину. На первый взгляд, электроны рассеивались хаотично. Однако после совмещения большого числа регистрирующих фотопластинок увидели «нормальную» дифракционную картину. Таким образом, следует считать электрон «размазанным» в пространстве – как волна, которая может пройти одновременно в две щели. А футбольный мяч не может одновременно оказаться в двух воротах из-за малости своей дебройлевской длины волны. Припомним, что свет большой частоты так же не даёт дифракционной картины на далеко отстоящих щелях. Из сказанного следует, что надо забыть о классическом представлении «траектории» частицы, поскольку она, подобно волне, находится в разных точках пространства.

## § 1.6. Строение атома по Бору

Одним из парадоксов классической физики была невозможность существования планетарной модели атома с точки зрения классической электродинамики. Для объяснения этого парадокса Нильс Бор предположил существование стационарных состояний электронов в атоме как некоторое дополнительное условие. Нильс Бор первый внёс существенный взгляд в формирование взглядов на микромир в квантовой трактовке, он, в каком-то смысле, угадал условия, определяющие стационарные состояния электрона в атоме. Однако условия квантования Бора естественным образом следуют из теории де Бройля. Как мы уже говорили, сам де Бройль именно этот аргумент считал главным обоснованием своей гипотезы – данные по дифракции частиц появились позже.

Создатели квантовой механики Шредингер и Гейзенберг строили теорию так, чтобы постулаты Бора о строении атома получались в ней естественным образом. После того как квантовая механика была создана, эти постулаты утратили своё значение и представляют скорее историческую ценность:

1) Бор постулировал, что электроны могут двигаться вокруг атома не по всем орбитам, как говорит классическая физика, а лишь по определённым (планетарная модель). Таким образом он хотел объяснить дискретность спектров пропускания и поглощения. Затем в квантовой механике отбросили представление о классических орбитах вообще.

2) Второй постулат связан с излучением атомов. Если электрон двигается с центростремительным ускорением вокруг заряженного ядра, то, согласно классической электродинамике, он должен непрерывно излучать. Бор постулировал, что излучение происходит лишь при переходе с одной разрешённой орбиты на другую (или из одного стационарного состояния атома в другое).

3) Третий постулат Бора позволяет отличить разрешённые орбиты от запрещённых. По Бору, момент количества движения (момент импульса) электрона, движущегося по разрешённой орбите, всегда должен быть кратен постоянной Планка. Это утверждение справедливо, если отбросить представление об орбитах.

где *n*=0, ±1, ±2...

– проекция момента импульса на некоторую ось Z.

Итак, по гипотезе де Бройля, с каждым электроном связан некоторый волновой процесс. Рассмотрим электрон, движущийся по круговой орбите. При каком условии это движение будет стабильным? С точки зрения гипотезы де Бройля ответ очевиден: если на траектории электрона уложится целое число дебройлевских волн. В этом случае возникнет стоячая волна, т.е. состояние этого волнового процесса будет стационарным. Запишем это условие формально:

или *.*

Далее остается записать механику движения электрона с зарядом *– е* в поля ядра с зарядом *+Ze*. Ускорение электрона, движущегося по круговой орбите вокруг ядра c радиусом r, равно

, или .

При этом, согласно постулату Бора, момент импульса электрона равен а его скорость . Тогда радиусы орбит будут определяться как

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (1.12) |

где – радиус первой боровской орбиты, . Более точно следует сказать, что – это расстояние, на котором максимальна вероятность найти электрон в невозбуждённом атоме водорода.

Найдем теперь полную энергию электрона на боровской орбите. Потенциальная энергия электрического взаимодействия электрона с ядром, согласно закону Кулона, равна

=.

Кинетическая, связанная с движением электрона, запишется как

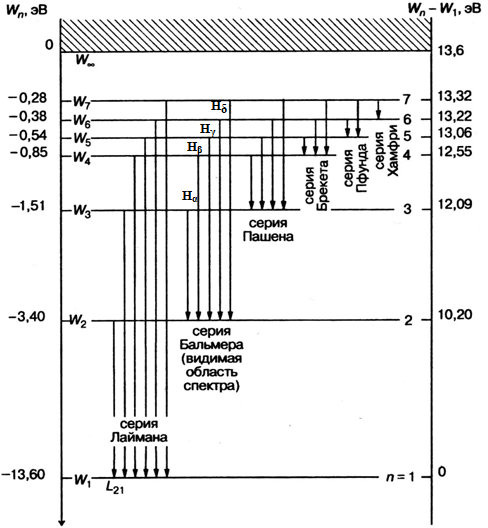
===.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| . |  | (1.13) |

Мы убедились в справедливости правила частот (1.1) для линий испускания. Иными словами, при переходе с уровня на уровень избыток энергии, пропорциональный разности (), излучается в виде электромагнитной волны.

С ростом числа n уровни энергии атома сближаются, в пределе при  дискретный спектр приближается к непрерывному, а квантовая система – к классической. Это и есть принцип соответствия Бора, который позволяет выразить энергию электронов в атоме через фундаментальные постоянные.

Совокупность длин волн (или частот), излучаемых телом, называют спектром излучения этого тела. Как мы видим, вследствие квантования (т.е. дискретности) энергетических уровней электронов в атомах атомарные спектры излучения состоят из дискретного набора длин волн (частот). Такие спектры называются линейчатыми*.* Совокупность спектральных линий, т.е. длин волн или частот, соответствующих переходам на один и тот же энергетический уровень n1 образует серию линий (см. рис. 1.13):



*Рис. 1.13.* Энергетическая диаграмма атома водорода

– совокупность переходов в *основное* состояние (n1 = 1) образует серию Лаймана;

– переходы в состояние с n1 = 2 образуют серию Бальмера;

– переходы в состояние с n1 = 3 образуют серию Пашена.

Визуально мы можем наблюдать только серию Бальмера: для водорода – n1 = 2, n2 = 3, 4, 5, 6.

### Замечание 1

Длины волн спектральных линий первых трёх серий атома водорода предлагаем вам рассчитать самостоятельно, пользуясь правилом частот (1.2) или формулой (1.13). Определите область шкалы электромагнитных волн для каждой серии переходов.

### Замечание 2

Модель атома водорода Бора-Резерфорда рассматривает единственный электрон. Таким образом, эта модель непосредственно применима только к атому водорода, в некоторой степени к щелочным металлам или сильно ионизированным атомам. Рассмотрение задачи о реальном атоме оказывается очень сложной и практически неразрешимой задачей многих тел (например, в атоме меди 29 электронов). Однако оказывается, что очень многое в устройстве атома можно понять, оттолкнувшись от модели атома водорода. Цель этого раздела – показать, как квантовая физика объясняет строение атомов и структуру таблицы Менделеева.

Как мы уже неоднократно отмечали, сохраняющиеся величины играют важную роль в квантовой физике. В частности, задание достаточно полного набора сохраняющихся величин полностью и однозначно характеризует состояние квантовомеханической системы. Для движения электрона вокруг ядра водородоподобного атома выполняются законы сохранения энергии и момента импульса. Поэтому состояние электрона характеризуется его энергией и моментом импульса.

Положения, которые понадобятся в дальнейшем, и которые мы примем без доказательства:

1. Точное решение задачи об уровнях энергии электрона в водородоподобном атоме приводит к тому же результату, что и модель Бора.

2. Энергия определяется только главным квантовым числом n.

3. В состоянии с главным квантовым числом n орбитальное квантовое число L (момент импульса в единицах постоянной Планка «с чертой» ℏ) может принимать целые значения.

4. Два электрона не могут занимать одно состояние.

## § 1.7. Принцип неопределенности

Физические величины никогда не могут быть измерены абсолютно точно. Ошибку измерения или «неопределённость» (этот термин принят только в квантовой физике) будем обозначать символом для координаты – , для импульса – р, для времени – t. В классической физике не было никаких принципиальных ограничений на бесконечное повышение точности измерения физической величины и уменьшение неопределенности. Но, как выяснилось, для микромира существуют принципиальные ограничения. Они были названы В. Гейзенбергом в 1927 г. **соотношениями неопределённости** или **принципом неопределённости**.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| *ћ,*  *.* |  | (1.14 а)  (1.14 б) |

Здесь – длительность измерения энергии, а – её неопределенность. Выражение (1.14 а) означает, что если координата объекта *х* известна с точностью , то компоненту импульса можно измерить с точностью не лучше

.

Согласно (1.14 б) для измерения энергии с точностью до необходимо время не меньше чем

.

Если система неустойчива (например, радиоактивное ядро), то из-за конечности времени жизни системы её энергия всегда имеет неустранимый энергетический разброс, равный

.

**Замечание 1**

Опять же, ключевая роль в принципе неопределенности принадлежит ћ. Если →0, то мы переходим к классической физике и снимаем запрет (1.14). Физический смысл соотношения неопределенности очень долго обсуждался. В основном это соотношения определяется корпускулярно-волновым дуализмом.



Действительно, если частица – волна, то исключается возможность определить её траекторию. Допустим, что у частицы есть траектория. Это означает, что положение частицы x(t) в момент tоднозначно определяет координату x(t+dt) в момент (t+dt):



х(t+δt = х(t)+(t)·δt.

Понятно, что если мы абсолютно точно знаем и координату, и скорость, то мы знаем траекторию, а для волны это невозможно.

Таким образом, если бы мы захотели посмотреть на траекторию электрона, то мы смогли бы это сделать только в классическом случае. Например, в камере Вильсона с очень низкой точностью осуществляются измерения координаты и времени. А вот если бы гипотетически мы начали уменьшать время между измерениями δt и перешли к микромиру, то увидели бы, что «движение» электрона вовсе перестает укладываться на гладкую траекторию.

Однако для макромира соотношение неопределённостей не играет существенной роли. Возьмем дробинку. При визуальном наблюдении точность определения ее координаты порядка длины волны, т.е. .

Тогда согласно (1.14) погрешность определения импульса равна

.

И если масса дробины , то неточность в определении скорости практически неотличима от нуля:

т.е. шарик весом в 1 мг двигается по траектории.

### Замечание 2

Соотношение неопределенностей позволяет объяснить стабильность атома. Предположим, что электрон приближается к ядру. При этом уменьшается неопределенность в значениях координаты электрона и, следовательно, будет возрастать неопределенность в значении его импульса. Скорость должна будет увеличиваться. Действительно, если электрон двигается вокруг ядра, то его средний импульс в системе отсчёта, связанной с ядром, равен

=0.

Среднее значение координаты в такой системе <x> = 0.

Поэтому =,,. А поскольку в атомах движение электрона нерелятивистское, то

=,

и, следовательно, при увеличении растёт , в результате электрон должен приобрести дополнительную кинетическую энергию и перейти на более высокую орбиту.

Таким образом, соотношение неопределенностей приводит к отталкиванию электрона от ядра и стабильности системы в целом, т.е. электрон находится на таком расстоянии от ядра, чтобы силы отталкивания и кулоновского притяжения компенсировались, так что энергия электрона не излучается и он не испускает электромагнитные волны. Оценим размер атома водорода r0 исходя из соотношений неопределенностей. Энергия электрона в атоме водорода в системе отсчёта, связанной с ядром, равна

.

Здесь р – импульс электрона, r – его расстояние от ядра. Устойчивым будет положение, в котором эта энергия будет минимальна и выполнится условие локального экстремума

.

Дифференцируем и получаем боровский радиус атома водорода, совпадающий с экспериментальными данными

= 0,53 Å.

При расстоянии между электроном и ядром минимальная энергия равна

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (1.15) |

Эта энергия (ее модуль) требуется для удаления электрона на бесконечность, это потенциал ионизации атома водорода. Вычисленное значение прекрасно совпадает с экспериментальными данными.

### Замечание 3

Отметим ещё раз, что квантовая физика, по существу, не описывает какой-то конкретный класс физических явлений, скорее, она обеспечивает универсальную теоретическую основу, которую можно использовать во всех областях физики, – так операционная система компьютера обеспечивает базу, на которой могут исполняться другие приложения. Употребление термина «квантовая механика» сложилось исторически, поскольку впервые квантовую основу удалось успешно применить при исследовании механического движения электронов в атоме. Более удачные термины – «квантовая физика» или «квантовая теория». Так что предмет квантовой механики (квантовой физики) глобален: она охватывает все физические явления во Вселенной.

Однако применять квантовый подход имеет смысл только в случае очень маленьких (микроскопических) физических систем. Поведение более крупных систем очень хорошо аппроксимируется законами классической физики, намного более простыми и интуитивно понятными, по крайней мере, для существ, эволюция которых проходила именно на этом масштабе величин.

Проиллюстрируем это примером. Согласно принципу неопределенности Гейзенберга, координату и импульс частицы невозможно измерить точно и одновременно: произведение неопределенностей составляет по крайней мере, . Чтобы макроскопический объект с массой порядка 1 килограмма достиг предела неопределенности, потребовалось бы измерить и координату объекта с точностью порядка ~10–17 м, и скорость с точностью ~10–17 м/с. Это, разумеется, нереально, так что для всех практических целей мы можем просто забыть о принципе неопределенности и рассматривать координату и импульс как точные величины. Но для электрона массой ~10–30 кг произведение неопределенностей координаты и скорости составит около , что вполне укладывается в экспериментально доступную точность измерений и должно приниматься во внимание. Таким образом, предсказания квантовой теории отличаются от классических только для относительно простых микроскопических объектов. Это объясняет, почему квантовая механика была открыта лишь в начале XX века. До того времени мы (сами представляющие собой макроскопические тела) имели дело исключительно с макроскопическими предметами. Но стоило нам изобрести инструменты, позволяющие достаточно глубоко проникать в микроскопический мир, как сразу же проявились квантовые явления.

Это пример **принципа соответствия** – философской максимы, согласно которой любая новая, более современная теория должна воспроизводить результаты более старых, устоявшихся теорий в тех областях, где эти теории были проверены [1].

Вот еще один пример для иллюстрации этого принципа. Пока мы имели дело только с объектами, движущимися намного медленнее света, для описания окружающего нас мира достаточно было ньютоновой механики. Но стоило нам получить возможность наблюдать тела, которые движутся быстро (например, Земля вокруг Солнца в эксперименте Майкельсона – Морли), мы начали замечать несоответствия и вынуждены были разработать **теорию относительности** [3, с. 189-200**]**. Эта теория заметно отличается от ньютоновой механики, но тем не менее согласуется с ней в предельном случае низких скоростей. Было бы неразумно использовать специальную теорию относительности для описания, например, трансмиссии трактора, потому что классическое приближение в данном случае и вполне достаточное, и многократно более простое в применении. Аналогичным образом использование квантовой физики для описания макроскопических явлений в большинстве случаев было бы переусложненным и ненужным.

# Глава 2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Изучим вначале основы квантовой физики простейшей движущейся системы: точечной частицы с одной-единственной степенью свободы. Хотя, на первый взгляд, такая система может показаться чем-то вроде «сферического коня в вакууме», эта модель считается вполне релевантной для многих практических физических ситуаций, удивительно хорошо описывая их свойства. Более того, квантовая теория одномерного движения снабдит нас теоретическими инструментами для изучения более сложного трехмерного движения. Эту теорию можно применить к движению электронов в атомах при расчете атомных спектров излучения и поглощения. Затем эти спектры можно сравнить с результатами экспериментов, обеспечив таким образом базу для подтверждения или опровержения квантовой теории. Замечательное совпадение этих результатов стало основным фактором триумфа квантовой теории в начале ХХ века.

## § 2.1. Вероятностное описание состояний физических систем. Волновая функция

В классической физике состояние физической системы с *n* степенями свободы в некоторый момент времени *t* полностью определяется значениями *n* обобщенных координат и *n* обобщённных скоростей. При этом предполагается, что все эти 2*n* параметров можно точно измерить.

А в квантовой механике приходится вводить вероятностное описание физических систем. Мы не можем указать в момент *t* обобщённые координаты X=[x1, х2, ... xn], а имеем дело лишь с плотностью их распределения ρ(x,t). Зная ρ, мы знаем вероятность того, что, измеряя в момент времени *t* переменную Х в нашем состоянии, получим значение в интервале (X, X+dX)

|  |  |
| --- | --- |
| dW (X, t) = ρ (X, t) dX. | (2.1) |

Основой математического аппарата квантовой механики служит утверждение, что состояние системы может быть описано комплексной функцией координат и времени как параметра – **волновой функцией**.   
Физический смысл имеет квадрат модуля волновой функции

,

который определяет плотность вероятности обнаружения частицы в точке с координатой *х* в момент времени *t*. Волновая функция Ψ (x, t) или амплитуда вероятности определяют плотность распределения динамических параметров – координат

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| ρ (x, t) = │Ψ (x, t)│2. |  | (2.2) |

Величина |Ψ2dx| есть вероятность того, что произведенное над системой измерение обнаруживает значение координат в интервале (*x, x+dx*) – именно так вводится понятие «измерение» и его результат. Волновую функцию ввел в употребление Шредингер в 1926 г.

Знание волновой функции позволяет в принципе вычислить результаты измерений различных физических величин, а не только координат. При этом все эти вероятности определяются выражениями, билинейными по Ψ, и её комплексно сопряженному значению Ψ\*. Наиболее общий вид такого выражения равен среднему значению (математическому ожиданию) величины *φ*:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| ∫∫ Ψ(x) φ(x, x’) Ψ\*(x’)dxdx’. |  | (\*) |

Полную вероятность, как вы знаете, принято считать равной единице, и поэтому должно выполняться условие

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 2 dx = 1. |  | (2.3) |

Условие (2.3) называется условием нормировки. Интегрирование в (2.3) нужно проводить по всему конфигурационному пространству.

**Замечание 1**

Поскольку все вычисляемые непосредственно с помощью волновой функции физические величины имеют вид (\*), в него входит произведение Ψ на Ψ\*, то ясно, что нормированная волновая функция определена лишь с точностью до постоянного фазового множителя вида exp(iα), где α – действительное число. Эта неоднозначность принципиальна и не может быть устранена. Однако она несущественна для нас, так как не отражается на физических результатах. Из этого утверждения следует замечание 2.

**Замечание 2**

Интегральную запись принято заменять сокращённым выражением следующего вида:

|  |  |
| --- | --- |
| . |  |

Например, условие нормировки (2.3) будет иметь вид

### 2.1.1 Принцип суперпозиции

В основе квантовой механики лежит ряд утверждений относительно свойств волновой функции. Одно из них формулируется так: если возможными являются состояния ψ1… ψn,. то существует и состояние, являющееся их линейной комбинацией:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| , |  | (2.4) |

где Сn – некоторые комплексные числа.

Условие 2.4 является **принципом суперпозиции** состояний.

**Замечание 1**

В частности, принцип суперпозиции для двух состояний можно сформулировать так: пусть в состоянии Ψ1(х) некоторое изменение приводит с достоверностью к неопределенному результату А, а в состоянии Ψ2(х) – к результату В. Тогда всякая линейная комбинация С1Ψ1+С2Ψ2 описывает состояние, в котором то же самое состояние дает либо результат А, либо результат В.

**Замечание 2**

Суперпозиция тех состояний системы, которые определяются значениями некоторой измеряемой физической величины *р*, изменяющейся непрерывно, а не дискретно, находится не суммированием, а интегрирова­нием:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| , |  | (2.5) |

где с(р) – некоторая комплексная функция переменной р.

**Замечание 3**

Принцип суперпозиции в таком понимании существует и в классической физике, например, при одновременном распространении волн малых амплитуд эти волны складываются, не влияя друг на друга.

## § 2.2. Операторы

Рассмотрим некоторую физическую величину *f*, характеризующую состояние квантовой системы. Значения, которые может принимать данная физическая величина, называются в квантовой механике **собственными значениями**, а об их совокупности говорят как о **спектре собственных значений**. Если величина, как в классической физике, имеет непрерывный ряд значений, то говорят о **непрерывном спектре** собственных значений. Если же собственные значения образуют дискретный набор, говорят о **дискретном спектре**.

Рассмотрим величину *f* с дискретным спектром. Обозначим ее собственные значения как *fn , n=*0, 1, 2… Обозначим Ψn волновые функции системы в состоянии, в котором величина *f* имеет значение *fn* . Тогда волновые функции Ψn называются **собственными функциями** физической величины *f*. Естественно что для каждой собственной функции выполняется условие нормировки

|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.6) |

Если система находится в состоянии с волновой функцией Ψ, то произведенное над ней измерение даст в результате одно из собственных значений *fn* .

В соответствии с принципом суперпозиции (2.4) можно утверждать, что Ψ является линейной комбинацией Ψn, которые отвечают собственным значениям *fn*, могущим быть обнаруженными с не равной нулю вероятностью при измерении, произведенном над системой, находящейся в рассматриваемом состоянии.

Поэтому в общем случае

|  |  |
| --- | --- |
| , | (2.7) |

где *аn* – постоянный коэффициент, принадлежащий множеству комплексных чисел.

Таким образом, любая волновая функция может быть разложена по собственным функциям любой физической величины *f*.

Понятно, что квадрат модуля коэффициента │*аn*│2 определяет вероятность получить значение *fn* величины *f* в состоянии с волновой функцией Ψ. Следовательно, для спектра *аn* также справедливо условие нормировки:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.8) |

Таким образом, справедливо равенство

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.9) |

Здесь . Проведём вычисление интеграла в (2.9):

,

оттуда получаем:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.10 *а*) |

Или, окончательно подставив разложение (2.7) и учитывая, что   
коэффициенты и – постоянные величины, получим:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.10 *b*) |

Отсюда видно, что собственные функции должны удовлетворять условию

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.11) |

Здесь называется дельта-функцией, а все волновые функции Ψm и Ψn при взаимно ортогональны.

Таким образом, полный набор собственных функций {Ψn} образует полную систему нормированных и взаимно ортогональных (ортонормированных) функций.

Введем понятие **среднего значения** величины *f* в некотором состоянии.

Среднее значение определяется как сумма всех собственных значений *fn* данной величины *f*, умноженных на соответствующую вероятность ее обнаружения :

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| =. |  | (2.12) |

Запишем теперь не через коэффициенты разложения *аn* , а через саму волновую функцию Ψ.

**Оператором** называют **правило**, согласно которому одной функции Ψ сопоставляется другая функция φ:

.

Оператор обозначают буквой со «шляпкой» над ней, например, , . Объектами применения операторов могут быть функции одной или нескольких переменных, как непрерывных, так и прерывных, принимающих только определенные значения. Непрерывные переменные могут принимать либо все значения числовой прямой, либо меняться в определённом промежутке. Независимые переменные мы будем всегда предполагать вещественными, а функции, к которым применяются операторы, в общем случае считать комплексными. Под аргументом *х* функции ψ(*х*), если это не оговорено особо, будем понимать одну или несколько непрерывных переменных.

Пусть обозначает результат воздействия оператора на волновую функцию Ψ. Определим так, чтобы интеграл от произведения () на комплексно сопряжённую функцию Ψ\* был равен среднему значению величины *F*:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.13) |

**Замечание 1.** Из (2.13) следует **линейность** оператора , т.е. выполняются свойства:

, а также

.

В дальнейшем перестанем записывать круглые скобки, подразумевая

.

Покажем линейность оператора , введенного выражением (2.13).

Действительно, воспользуемся (2.10 а) в комплексно сопряженном виде и перепишем (2.12) как

|  |  |
| --- | --- |
| = | (2.14) |

Сравнивая с выражением для среднего значения функции ḟ (2.13), получаем

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.15) |

Теперь подставим в (2.15) выражение (2.10 a):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.16) |

Здесь

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.17) |

называется ядром оператора .

**Замечание 2.** Из (2.15) видно, что если функцией Ψ является одна из собственных значений Ψn (в этом случае, согласно условию нормировки, все коэффициенты, кроме , равны нулю, а ), то тогда в результате воздействия *f* Ψ эта функция просто умножается на соответствующее собственное значение *fn,* то есть

|  |  |
| --- | --- |
| *.* | (2.18) |

Таким образом, собственные функции данной физической величины *f* являются решением уравнения

|  |  |
| --- | --- |
| *,* | (2.19) |

где *f –* постоянная, а собственные значения – это те значения *f*, при которой (2.19) имеет решение, удовлетворяющее требуемым условиям.

Так как собственные значения физической величины и ее среднее значение являются вещественными, то это накладывает некоторые ограничения на свойства соответствующих операторов.

Действительно, из (2.13) следует:

|  |  |
| --- | --- |
| *,* | (2.20) |

где – оператор комплексно сопряженный.

Дадим определение. Поскольку , то выполняется равенство .

Для произвольного оператора можно указать **транспонированный** с ним **оператор** , определяемый выражением

|  |  |
| --- | --- |
| *,* | (2.21) |

где φ и Ψ две различные функции.

Теперь если вместо φ взять то, согласно (2.20),

*,* или

|  |  |
| --- | --- |
| *.* | (2.22) |

Если оператор удовлетворяет условию (2.22) то его называют   
**эрмитовым** оператором.

Таким образом, мы показали, что операторы, отвечающие в квантовой механике вещественным физическим величинам, должны быть эрмитовыми. На самом деле при помощи математического формализма можно ввести в рассмотрение комплексные физические величины.

Пусть *f –* некоторая комплексная физическая величина, *–* величина, комплексно с ней сопряжённая, тогда имеет собственные значения, комплексно сопряжённые с собственными значениями *f*. Оператор, соответствующий величине , обозначим через *–* его называют сопряженным оператору , строго говоря, он отличается от *–* комплексно сопряжённого.

Действительно, по определению для среднего значения величины

Но одновременно, согласно (2.21), должно выполняться равенство

.

|  |  |
| --- | --- |
| *.* | (2.23) |

Для вещественной величины мнимая часть равна нулю:  
, , поэтому условие (2.23) можно переписать в более общем виде:

|  |  |
| --- | --- |
| *.* | (2.24) |

Иными словами, оператор вещественной величины совпадает со своим сопряжённым ‒ поэтому эрмитов оператор называют **самосопряжённым.**

## § 2.3. Сложение и умножение операторов

Если и – операторы, соответствующие двум различным физическим величинам *f* и *g*, то сумме (*f+g*) отвечает оператор .

Однако смысл оператора существенно меняется в зависимости от того, могут ли величины и *g* быть измеренными одновременно. Если   
*f* и *g* одновременно измеримы, то и имеют совместные собственные функции, которые являются в то же время и собственными функциями оператора , а его собственные значения равны *fn+gn* . Если же *f* и *g* не могут одновременно иметь определённых значений, то смысл их суммы ограничен. В этом случае можно лишь утверждать что

|  |  |
| --- | --- |
| *.* | (2.25) |

При этом собственные значения суммы могут и не совпадать с собственными значениями и .

Очевидно, что если и – эрмитовы, то эрмитовым будет и оператор , т.е. его собственные значения вещественны и представляют собой собственные значения новой величины *f+g*.

**Свойства суммы**

Пусть *f*0 и *g*0 – наименьшие собственные значения величин *f* и *g,* а (*f*+*q*)0 – то же для *f*+*q*.Тогда справедливо утверждение что

|  |  |
| --- | --- |
| (. | (2.26) |

Знак равенства имеет место, если *f* и *g* одновременно измеримы.

Теперь введем понятие **умножения операторов**. Пусть *f* и *g* – одновременно измеримы, тогда **произведение** *f∙g* есть величина, собственные значения которой равны произведению собственных значений *f* и *g.* Произведение является последовательным действием на функцию :

|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.27) |

Очевидно, что порядок действия операторов в этом случае несущественен:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.28) |

В математике о таких операторах говорят как о коммутативных. Таким образом, мы приходим к важному выводу:

Если две величины *f* и *g* могут иметь одновременно определённые значения, то их операторы коммутативны друг другу. Отсюда сразу можно ввести понятие **обратного оператора** и .

|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.29) |

Если же величины *f* и *g* неизмеримы одновременно, то понятие их произведения не имеет указанного выше прямого смысла.

Тогда оператор не является эрмитовым и, следовательно, не соответствует вещественной физической величине.

В этом случае комбинация

может быть отличной от нуля. При этом называется **коммутатором** операторов .

### 2.3.1. Операторы важнейших физических величин

**1. Операторы важнейших физических величин**

В квантовой механике постулируется, что **оператором пространственной координаты** является оператор умножения на т.е.

|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.30) |

Оператором **обобщённого импульса** является оператор

|  |  |
| --- | --- |
| , | (2.31) |

Здесь *i –* мнимая единица, – постоянная Планка, – дифферен­циальный оператор Гамильтона «набла». В дальнейшем, где это не может привести к недоразумению, обобщенный импульс будем называть просто **импульсом**. Оператор **потенциальной энергии** частицы

|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.32) |

Оператор **кинетической энергии** частицы

|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.33) |

**Моменту импульса** частицы сопоставляется оператор

|  |  |
| --- | --- |
| *,* | (2.34) |

Или, в более компактной форме,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.35) |

где , а – антисимметричный тензор третьего ранга с компонентой .

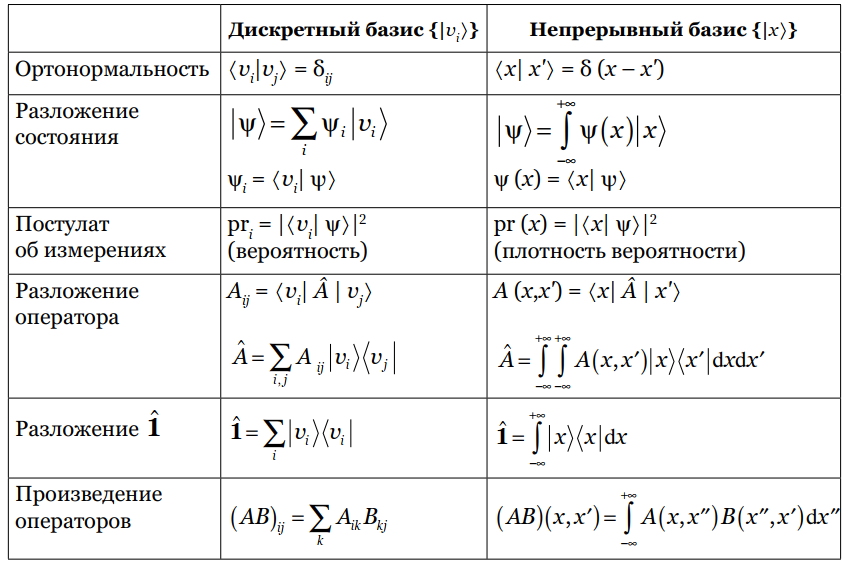
**Замечание 3**

Покажем, что коммутатор не обладает свойством перестановочности:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.36) |

**Замечание 4**

*Таблица 2.1.* **Сравнение правил работы с дискретно-   
и непрерывно-переменными базисами**

****

**2. Непрерывный спектр**

Все, что мы ввели для дискретного спектра – волновые функции с дискретным спектром собственных значений – без труда может быть обобщено на случай непрерывного спектра собственных значений. Пусть   
*f* – непрерывная величина, ее собственные значения будем обозначать так же *f*, но уже без индекса, а собственную функцию обозначим .

Подобно разложению в ряд функция также может быть разложена, но теперь уже в интеграл

|  |  |
| --- | --- |
| *,* | (2.37) |

где интегрирование производится по всей области значений, которые может принимать величина *f*.

Поскольку сумма вероятностей всех возможных значений *f* должна быть равна единице, условие нормировки запишется как

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.38) |

Как видно, прослеживается полная аналогия с дискретным спектром.

Теперь по аналогии с выводом (2.10 а), получим выражения для разложения в непрерывный спектр

С другой стороны,

.

|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.39) |

## § 2.4. Гамильтониан

Как уже было сказано, волновая функция полностью описывает состояние системы. Это означает, что задание в некоторый момент времени определяет также ее поведение и в следующий момент времени, конечно же, с учетом принципа неопределённости.



Математически этот факт выражается тем, что производная должна определяться значением в тот же момент времени τ. Причем зависимость эта, согласно принципу суперпозиции (2.5), должна быть линейна.



Данные утверждения в наиболее общем виде можно зафиксировать так:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.40) |

Здесь – некоторый линейный оператор, свойства которого и вид, а также наличие множителя объясним позже. Поскольку есть полная вероятность и не зависит от времени, то

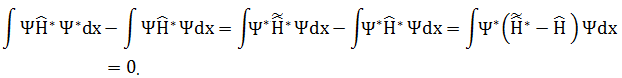


.



Воспользовавшись (2.40) и опустив общий множитель, получим





Поскольку последнее равенство выполняется для любой произвольной функции , то это уравнение означает, что или (оператор – эрмитов).



называется **гамильтонианом** или **оператором полной энергии:**



|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.41) |

## § 2.5. Дифференцирование операторов по времени

Понятие производной физической величины в квантовой механике отличается от принятого в классической физике. Действительно, в классической физике понятие производной связано с измерениями или рассмотрениями физической величины в бесконечно близкие моменты времени

.



В квантовой механике принцип суперпозиции (2.5) не дает возможности вводить такое определение.

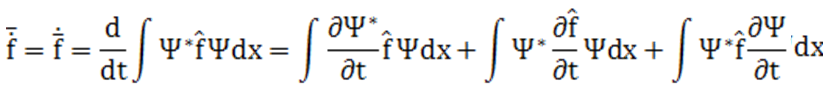
Поэтому определим производную от величины *f* как величину, среднее значение которой равно производной по времени от среднего значения . Таким образом



|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.42) |

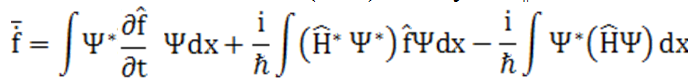
Исходя из этого определения, нетрудно получить выражение для оператора , соответствующего величине :



**.**

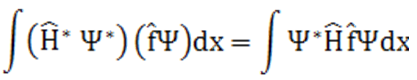
Здесь есть оператор, полученный дифференцированием по времени *t*, от которого последний может зависеть как от параметра. Подставим выражение для производных из (2.40) и получим



**.**

Так как оператор Гамильтона эрмитов, то



**.**

Таким образом, имеем

.



Это выражение ‒по определению среднего значения ‒ должно быть равно правой части выражения (2.20)

Следовательно, всё, что стоит в скобках это искомый оператор :



|  |  |
| --- | --- |
| **.** | (2.43) |

Если не зависит в явном виде от времени, то выражение (2.43) сводится с точностью до множителя к коммутатору оператора с гамильтонианом .



### Замечание

Очень важной категорией физических величин являются те, операторы которых не зависят явно от времени и, кроме того, коммутативны с гамильтонианом, так что производная по времени равна нулю .



Такие величины называются **сохраняющимися.** Для них выполняется условие , то есть . Среднее значение этих величин остается постоянным во времени.



## § 2.6. Стационарные состояния

Гамильтониан замкнутой системы, а также системы, находящейся в постоянном внешнем поле, не может содержать времени в явном виде, для такой физической величины любой момент времени равнозначен. Следовательно, в замкнутых системах функция Гамильтона сохраняется. Постоянная во времени функция Гамильтона называется **энергией**.

Смысл закона сохранения в квантовой механике состоит в том, что если в данном состоянии энергия имеет определенное значение, то это значение не изменяется во времени. Состояния, в которых энергия имеет определённые значения, называются **стационарными состояниями**.

Они описываются волновой функцией, являющейся статистичес­кой функцией оператора Гамильтона, т.е. удовлетворяет уравнению



,



где – собственные значения энергии. Соответственно этому, волновое уравнение (2.40) для примет вид



|  |  |
| --- | --- |
| **.** | (2.44) |

В уравнении (2.44) можно разделить переменные и непосредственно проинтегрировать по времени:

|  |  |
| --- | --- |
| **.** | (2.45) |

Здесь – функция только координат.



Стационарное состояние с наименьшим из всех возможных значений энергии называется **нормальным** или **основным** состоянием системы. Такое состояние квантовой системы является наиболее устойчивым, прочным и стабильным.

Разложение произвольной волновой функции по волновой функции стационарных состояний имеет вид



|  |  |
| --- | --- |
| **.** | (2.46) |

Коэффициенты разложения , как обычно, определяют вероятности различных значений энергии системы.



Распределения вероятностей для координат в стационарных состояниях не зависят от времени. То же самое относится и к средним значениям



.



всякой физической величины *f*, оператор которой не зависит от времени явно.

Очевидно, что оператор любой сохраняющейся физической величины коммутативен с гамильтонианом ‒ это означает, что любая физическая величина может быть измерена одновременно с энергией.

Среди различных стационарных состояний могут быть и такие, которые соответствуют одному и тому же собственному значению энергии ‒ **энергетическому уровню**, отличаясь значениями каких-либо других физических величин, например, спином.

О таких уровнях энергии, которым соответствует по нескольку различных стационарных состояний, говорят как о **вырожденных**.

## § 2.7. Матрица

Рассмотрим для удобства систему с дискретным спектром собственных значений и ‒ разложение волновой функции по стационарным состояниям. Если подставить это разложение в определение (2.13) для среднего физической величины *f*, получим:



|  |  |
| --- | --- |
| **,** | (2.47) |

где

|  |  |
| --- | --- |
| **.** | (2.48) |

Вся совокупность элементов называется **матрицей** величины *f*, а о каждом из говорят как о **матричном элементе**, соответствующем переходу из состояния m в состояние n. Матричное представление физических величин было введено Гейзенбергом в 1925 г. еще до открытия с Шредингером волнового уравнения.



Зависимость от времени определяется, если оператор не содержит времени в явном виде, зависимостью от времени функции .



Подставляя в (2.48) выражение (2.45), найдём

|  |  |
| --- | --- |
| **,** | (2.49) |

где частота

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.50) |

называется **частотой перехода** между состояниями n и m.

Величины

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.51) |

составляют не зависящую от времени матрицу величины *f*. Обычно именно ею и пользуются.

Получим **правило умножения** матриц. Для этого заметим предварительно, что имеет место формула

|  |  |
| --- | --- |
| *.* | (2.52) |

Это обычное разложение функции по функциям с коэффициентами, определяемыми согласно общему правилу (2.10 а).



Тогда напишем выражение для результата действия на произведения двух операторов



.



Поскольку, с другой стороны, должно быть , то приходим к выводу, что матричные элементы произведения двух операторов определяются формулой



|  |  |
| --- | --- |
| . | (2.53) |

Это правило, заново открытое Гейзенбергом, совпадает с принятым в математике правилом перемножения матриц: строки первой матрицы перемножаются со столбцами второй.

## § 2.8. Соотношение неопределенностей в операторном представлении

Обсудим уравнение (2.36), описывающее коммутацию между оператором импульса и координат.

Так как результат последовательного дифференцирования по одной координате и умножения на другую не зависит от порядка этих операций, то

, ,…и т. д. для.



А из (2.36) следует:

,



,



.



Получаем в общем виде:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| *.* |  | (2.54) |

Соотношение (2.54) показывает, что координата частицы вдоль одной из осей не может иметь определенное значение одновременно с компонентой импульса вдоль той же оси. При этом координата и компонента импульса вдоль различных осей могут быть измерены сколь угодно точно.

Это более общая (специальная) запись соотношения неопределенностей.

# Глава 3. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Как уже было сказано выше, обнаружение волновых свойств микрочастиц в XIX веке свидетельствовало о том, что классическая механика не может дать правильного описания подобных частиц. Новая механика микрочастиц, созданная Шрёдингером, Гейзенбергом, Дираком и другими, получила название **волновой** или **квантовой механики**. Основным уравнением квантовой механики является уравнение Шрёдингера. Подобно тому, как уравнения динамики Ньютона не могут быть получены теоретически, а представляют собой обобщение большого числа опытных фактов, уравнение Шрёдингера также нельзя вывести из каких-либо известных ранее соотношений. Его следует рассматривать как исходное основное предположение, справедливость которого доказывается тем обстоятельством, что все вытекающие из него следствия самым точным образом согласуются с опытными фактами.

Решая уравнение Шрёдингера, мы найдем множество энергетических собственных значений и собственных состояний для определенного потенциала, а также их динамику во времени.

Энергетические собственные состояния можно наблюдать экспериментально при помощи света. Переход между этими состояниями в атомах и молекулах связан с поглощением или излучением фотона, энергия которого равняется разнице соответствующих энергий в веществе. С по­мощью спектроскопии измеряя длины волн, на которых происходит поглощение или излучение, можно определить соответствующие энергии и тем самым проверить квантовые расчеты экспериментально [4, с. 31-38][[4]](#footnote-4).

Мы уже вводили форму гамильтониана ‒ оператора полной энергии (2.41):

.

Для системы, состоящей из N частиц, оператор Гамильтона является суммой n слагаемых:

, .

Здесь – масса n-ой частицы, а – оператор Лапласа, в котором дифференцирование проводится по координатам n-ой частицы.

В частности, для одной частицы с не зависящей от времени потенциальной энергией запишем

,

где – потенциальная энергия частицы во внешнем поле.

Подстановка этих выражений в дает волновые уравнения для соответствующих систем. Волновые уравнения для частицы во внешнем поле

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.1) |

Уравнение для стационарных состояний принимает вид

|  |  |
| --- | --- |
| . | (3.2) |

Уравнения (3.1) и (3.2) были установлены Шрёдингером в 1926 г. и называются уравнениями Шрёдингера.

**Замечание**

Для свободной частицы уравнение (3.2) примет вид

|  |  |
| --- | --- |
| . | (3.3) |

Это уравнение имеет конечные решения во всем пространстве решений при любых положительных значениях энергии ‒ для состояния с некоторым определённым направлением движения.

Полные (зависящие от времени) волновые функции таких стационарных состояний имеют вид:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (3.4) |

Каждая такая функция называется **плоской волной** и описывает состояние, в котором частица обладает определённой энергией E и импульсом . Частота этой волны равна , а её волновой вектор, совпадающий с направлением распространения, равен . Соответствующую длину волны называют **дебройлевской** **длиной волны** частицы (термин введен Луи де Бройлем в 1924 г.).

Таким образом, энергетический спектр **свободной** частицы оказывается непрерывным, простираясь от 0 до +.

Каждое из этих собственных значений, кроме E=0, вырожденно, причём вырождение бесконечной кратности. Действительно, каждому значению соответствует бесконечное множество собственных функций (3.4), которые отличаются направлением вектора при его одинаковой абсолютной величине.

## § 3.1. Основные свойства уравнения Шрёдингера

Сформулируем условия, которым должны удовлетворять решения уравнения Шрёдингера.

1) Прежде всего волновая функция должна быть однозначной и непрерывной во всем пространстве.

Требование непрерывности сохраняется и тогда, когда само поле имеет поверхности разрыва. На такой поверхности должны остаться непрерывными как сама функция , так и ее производные. Однако непрерывность последних не имеет места, если за некоторой поверхностью потенциальная энергия обращается в бесконечность . В эту область частица вообще проникнуть не может и, следовательно, там . Непрерывность требует, чтобы на той границе обращалась в нуль, производные же от в данном случае испытывают скачок.

Пусть минимальное значение потенциала . Поскольку , то среднее значение энергии в произвольном состоянии равно сумме .

Но все собственные значения оператора , совпадающего с гамильтонианом свободной частицы, положительны. Поэтому и среднее значение . Кроме этого, очевидно, что , тогда получим . А поскольку это неравенство справедливо для любого состояния частицы, то ясно, что оно справедливо для всех собственных значений энергии:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.5) |

То есть свободная частица обязательно обладает энергией, превышающей минимальное значение потенциального поля.

## § 3.2. Плотность потока

В классической механике скорость частицы связана с ее импульсом соотношением

.

В квантовой механике такая же связь имеет место между соответствующими операторами. В этом легко убедиться, вычислив оператор скорости как производную по времени согласно общему правилу дифференцирования.

.

Воспользовавшись выражением для гамильтониана (2.41), получим

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.5) |

Такие же соотношения будут иметь место между собственными значениями и , а также между их средними значениями в любом состоянии.

Как мы уже знаем, скорость, как импульс частицы, не может быть определена точно одновременно с координатами частицы. Это означает, что если частица находится в определенной точке пространства (а тогда ее скорость или импульс не определены), то она не будет иметь определенного положения в момент времени , где – бесконечно малое приращение.

Нам также известно, что интеграл в соотношении (2.39), взятый по некоторому конечному объему V, представляет собой вероятность нахождения частицы в этом объеме.

Найдем производную по времени от этой вероятности, используя уравнение (2.40):

.

Так как гамильтониан (2.41) эрмитов, то .

Используем также тождество

,

и получим

,

где есть некоторый вектор, равный

|  |  |
| --- | --- |
| . | (3.7) |

Напомним, что по теореме Гаусса интеграл от по объёму может быть преобразован в интеграл по замкнутой поверхности, окантовывающей этот объем V, т.е.

|  |  |
| --- | --- |
| , | (3.8) |

где – наружная нормаль к поверхности. Отсюда видно, что (3.8) аналогично уравнению непрерывности в интегральном виде.

|  |  |
| --- | --- |
| . | (3.9) |

Очевидно, что величина в форме (3.7) является потоком. Но так как уравнение непрерывности записано для вероятности , то есть поток вероятности.

Интеграл от этого вектора по замкнутой поверхности имеет смысл вероятности того события, что в течение единицы времени частица пересечет эту поверхность.

### Замечание 1

Волновую функцию свободного движения (плоскую волну) можно пронормировать так, чтобы она описывала поток частиц c равной единице плотностью ‒ поток, в котором через единицу площади за единицу времени проходит одна частица:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.10) |

Здесь v – скорость частицы.

Действительно, подставив волновую функцию вида (3.10) в уравнение (3.7) получим , т.е. единичный вектор в направлении движения.

### Замечание 2

Покажем, что из уравнения Шрёдингера следует взаимная ортогональность волновых функций состояний с различными значениями энергии.

Пусть и – две такие функции, удовлетворяющих уравнению (3.3):

.

Домножим первое уравнение на , а второе – на и вычтем из первого второе. Получаем

.

Если теперь проинтегрировать обе стороны этого уравнения по всему пространству, то правая сторона, будучи преобразованная по теореме Гаусса, даст

Так как на бесконечности и (иначе расходится), то интеграл по поверхности в правой части . Следовательно, получаем

.

А поскольку мы предполагали, что, следовательно, , и функции и ортогональны.

## § 3.3. Общие свойства одномерного движения

Представим такой случай: потенциальная энергия частицы зависит только от одной координаты x. Тогда волновую функцию можно искать в виде произведения. Из них первая определяется уравнением Шрёдингера (3.3) свободного движения, а вторая – одномерным уравнением Шрёдингера

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.11) |

И такое же одномерное уравнение ставит задачу о движении в поле с потенциальной энергией, равной сумме трех слагаемых

.

Волновая функция представляется произведением трёх функций различных координат, каждая из которых является решением одномерного уравнения Шрёдингера (3.11).

Для начала покажем, что в одномерной задаче все энергетические уровни дискретного спектра не вырождены. Для доказательства предположим обратное. Пусть и – две различные собственные функции, соответствующие одному и тому же уравнению (3.11). Имеем:

.

Или, иначе, . Разделяя переменные и интегрируя последнее равенство, находим

.

Граничным условием будет равенство нулю волновой функции на бесконечном удалении от начала координат:

, следовательно, .

Тогда получаем . Интегрируем еще раз и получаем

То есть обе функции по существу совпадают, так как при нормировке превратится в единицу и что и требовалось доказать.

Сформулируем (без доказательства) так называемую **осцилляционную теорему**: волновая функция дискретного спектра , соответствующая (n+1)-му по величине собственному значению , обращается в ноль (при конечных размерах области *x*) *n* раз.

Если частица может находиться только на ограниченном отрезке оси *x*, то надо говорить о нулях функции внутри этого отрезка.

## § 3.4. Потенциальная яма

В качестве простейшего примера одномерного движения рассмотрим движение частицы в прямоугольной потенциальной яме (рис. 3.1), т.е. в поле с функцией потенциальной энергии :

|  |
| --- |
|  |
| *Рис. 3.1.* Движение частицы в потенциальной яме |

Заранее очевидно, что в области локализации при спектр собственных значений будет дискретным, а при энергии, превышающей высоту стенок ямы (и произвольном *х*), мы будем иметь дело со свободным движением частицы и непрерывным спектром двухкратновырожденных уровней. Итак, в области можем записать уравнение Шрёдингера:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.12) |

Вне области потенциальной ямы:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (3.13) |

Очевидно, что в точках краёв ямы *x=-a; a* эти волновые функции , являющиеся решениями (3.12) и (3.13), должны быть сшиты (равны друг другу), и сами и непрерывны во всей области определения. Кроме этого, очевидно, что при решение уравнения должно давать при.

Рассмотрим теперь два варианта симметричной потенциальной ямы.

### 3.4.1. Бесконечно глубокая потенциальная яма

В этом случае (рис.3.2). Бесконечно высокие потенциальные стенки моделируют физическую ситуацию, в которой за счёт сил отталкивания частица не может оказаться вне области . Поэтому волновая функция частицы , и решение уравнения (3.12) в области потенциальной ямы имеет вид

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| или  , |  | (3.14 а) |

|  |
| --- |
|  |
| *Рис. 3.2.* Потенциальная яма  с бесконечно глубокими стенками |

где . Вне области U=0 вероятность найти частицу нулевая, .

Таким образом, решения (3.14 а) должны обращаться в ноль при . Заметим, что размер потенциальной ямы равен *L=*2*a.*

Указанное условие выполняется, если . Для чётного решения ().

В случае нечетных () решений , n=0, 1, 2…

Чётные и нечётные решения, таким образом, записываются общей формулой

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.15) |

Решения (3.15) мы записали с нормировочным множителем *,* значение которого находится из условия

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (3.16) |

Волновой функции с номером n соответствует энергия или, с учетом условия (3.15) для чётного и нечётного,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.17) |

=1,2,3… Нечётные значения соответствуют чётным решениям.

|  |
| --- |
|  |
| *Рис. 3.3.* Вид волновых функций –  решений задачи о потенциальной яме |

Наименьшую энергию имеет чётное решение, отвечающее n=0 и =1 (рис. 3.3). Состояние частицы, в котором она обладает наименьшей энергией, называется **основным состоянием**. Следующим по энергии расположено нечётное решение с n=1, =2. При этом чётные и нечётные решения чередуются по мере возрастания энергии.

Таким образом, энергетический спектр частицы оказывается дискретным с бесконечным количеством уровней энергии. Число , определяющее энергию частицы в потенциальной яме, называется **квантовым числом**, а соответствующее ему значение – -ым **уровнем энергии**.

Теперь на основе одномерного решения несложно найти обобщённое решение уравнения Шредингера для прямоугольного потенциального ящика в трёхмерном пространстве. Размеры ящика задаются областью

в которой энергия поля отрицательна ( и бесконечно велика вне этой области.

Путем нехитрой аппроксимации получаем значения энергии в виде

,

где .., а соответствующие, например, нечётные решения,

,

Для четных решений

Отметим, что если провести рассмотрение задачи о **несимметричной** потенциальной яме ‒ это область U=0 , то останутся только решения волновой функции в форме , которые будут давать весь спектр энергий.

### 3.4.2. Потенциальная яма конечной глубины

Рассмотрим теперь более реальную ситуацию – частица массы m ограничена стенками конечной высоты и находится в одномерной потенциальной яме глубиной . (см. рис. 3.1).

Тогда в области решение задачи не отличается от предыдущего случая, рассмотренного в п.п. 1. Но в областях требуется решать уравнение Шредингера вида (3.13)

Так как яма нами выбрана симметрично относительно оси ординат, то ясно, что решения должны обладать либо нечётной симметрией

,

либо чётной симметрией

.

Итак, если энергия частицы меньше потенциального барьера (частица не свободная, ), во внутренней области решение (3.12) можно представить в виде

,

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| где . |  | (3.18) |

В области общее решение является суммой экспонент:

.

Но для такое решение не удовлетворяет граничным условиям и, следовательно, . Для области по тем же соображениям приходится отбрасывать экспоненту с .

Тогда получаем

,

где знак «–» выбираем для и «+» для .

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (3.19) |

Мы уже говорили о том, что в случае конечной по величине потенциальной ямы должны выполняться граничные условия непрерывности волновой функции и её производной.

Из условия сшивки на границе x=*a* получаем (для четного решения).

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.20) |

Эту систему можно преобразовать в более простое условие:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (3.21 а) |

Аналогично, для нечетного решения

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.21 б) |

Иными словами, и должны удовлетворять либо (3.21а), либо (3.21а). Они должны удовлетворять условию:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.22) |

Это уравнение, полученное из (3.18) и (3.19), является уравнением окружности с радиусом в пространстве координат с осями и .

Таким образом, чтобы найти и , нужно решить систему уравнений (3.21 a и б) и (3.22). Это можно сделать графически: константы и находятся как точки пересечения окружности (3.22) с заданным потенциалом и для четных решений (n=0, 2, 4…) с (3.21 а), и для нечетных   
(n=1, 3, 5…) с (3.21 б).

Получение графических решений в пространстве () представлено на рис. 3.4: зная и *a,* строим окружность радиуса . Затем нанесём на эту же координатную плоскость линии . Полученная серия точек пересечения связывает величиныи откуда получаем спектр значений энергии частицы в данной потенциальной яме.

|  |
| --- |
|  |
| *Рис. 3.4.* Графическое решение задачи о частице в потенциальной яме |

### Замечание 1

Из графика видно, что чем больше величина потенциального барьера , тем больше радиус окружности и, следовательно, больше разрешённых связанных состояний.

Действительно, при росте возрастает число точек пересечения чётных и нечётных решений с этой окружностью.

Кстати, из рис. 3.4 очевидно, что хотя бы одно энергетическое состояние в симметричной потенциальной яме быть должно. Итак, если значение лежит в пределах

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (3.23) |

то имеется точно связанных состояний.

### Замечание 2

Как помним, в классической физике частица в принципе не могла проникнуть во внешние области потенциальной ямы, и вероятность нахождения частицы вне потенциальной ямы равна нулю: при .

Квантовомеханическая частица может в эти области пробираться.

### Замечание 3

|  |
| --- |
| *Рис. 3.5.* Вид волновых функций частицы в потенциальной яме |

Из графика (рис. 3.5) также видно, что с ростом n величина уменьшается. А ведь – аналог коэффициента поглощения. Поэтому чем больше поглощение , тем быстрее затухает волновая функция во внешних областях. Следовательно, чем выше n, тем лучше для данного уровня энергии проникает волновая функция во внешние области. Энергия n-го состояния определяется формулой

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.24) |

где — значение для.

### Замечание 4

Понятно, что превышение энергии освобождает частицу, и спектр значений энергии, которая она может иметь, становится непрерывным.

## § 3.5. Конечный потенциальный барьер. Туннелирование

При рассмотрении потенциальной ямы мы убедились, что квантовомеханическая частица может проникать внутрь областей, в которой потенциальная энергия больше ее кинетической энергии . Классическая частица туда не проникает.

Что же может произойти, если на пути распространения волны-частицы поставить потенциальный барьер конечной высоты?

Рассмотрим частицу, падающую слева на потенциальный барьер высотой и шириной *a*.

Сначала рассмотрим случай, когда ‒ классическая частица в этом случае должна была бы повернуть из точки x=0 обратно. Решением уравнения Шрёдингера являются функции

|  |  |
| --- | --- |
| , | (3.25) |

для которых A ‒ коэффициент отражения от потенциального барьера, B и C характеризуют процессы распространения и затухания в области D ‒ коэффициент прохождения сквозь барьер.

,

Формулы (3.25) записаны в предположении падающей волны exp единичной амплитуды. Волна же является отражённой, движущейся от потенциального барьера влево, поэтому её **волновой вектор** или **собственное число** импульса отрицательно. При волновая функция описывает частицу, которое проникнув через барьер, движется вправо ‒ такой процесс называется **туннелирование**.

Функция и вид вероятности нахождения частицы в каждой из областей указаны на рис. 3.6:

– при – это суперпозиция отраженной и падающей волны;

– при – это затухающая волна (вероятность пропорциональна множителю );

– при – это свободная волна, но с амплитудой в раз меньшей, чем падающая.

|  |
| --- |
| *Рис. 3.6.* Потенциальный барьер |

И, кроме того, решить систему (3.25) позволяет условие сшивки – непрерывности волновой функции и её производной в точках *x=a* и *x=*0.

Разрешая систему (3.25), находим **коэффициент прохождения**:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.26) |

Вероятность туннелирования частицы через барьер ‒ это вероятность найти ее за барьером при *x>a*, равная .

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.27) |

Из этой формулы видно, что при вероятность туннелирования T всегда меньше единицы.

Когда E> становится чисто мнимой (волна уже не затухает внутри потенциального барьера) и вместо (3.27) получаем:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (3.28) |

Поведение вероятности туннелирования в обоих случаях показано на рис. 3.7.

|  |
| --- |
| *Рис. 3.7.* Зависимость модулей компонент волновых функций от энергии |

Понятно, что R+T=1 ‒ частица либо проскочит барьер, либо отразится от него, .

### Замечание 1

Зачастую в рассмотрение вводятся не вероятности процессов T и R, а коэффициенты **прохождения** и **отражения**.

Коэффициент прохождения (**прозрачности**) определим как отношение плотности потока в прошедшей волне и плотности потока в падающей:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.29 а) |

Плотность потока в падающей волне, а в прошедшей , в отражённой . Можно ввести коэффициент **отражения** как отношение плотности потока отражённого к плотности падающего потока.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.29 б) |

### Замечание 2

С классической точки зрения туннельный эффект представляется абсурдным, поскольку частица, «находящаяся в туннеле», должна была бы обладать отрицательной кинетической энергией (в туннеле ). Однако «туннель» – явление специфически квантовое, не имеющее аналогов в классической физике. В квантовой же механике деление полной энергии на кинетическую и потенциальную не имеет смысла и противоречит принципу неопределённости.

Действительно, тот факт, что частица обладает определённой кинетической энергией *Т*, равнозначен тому, что частица имеет определённый импульс *р*. Аналогично, факт, что частица имеет определённую потенциальную энергию означает, что частица находится в точно заданном месте пространства. Поскольку координата и импульс частицы не могут иметь одновременно определённых значений, то не могут быть одновременно определены *Т* и . Таким образом, хотя полная энергия частицы имеет вполне определенное значение, она не может быть представлена в виде суммы точно определённых потенциальной и кинетической.

Ясно, что в этой ситуации и заключение об отрицательности *Т* в туннеле становится беспочвенным.

### Замечание 3

Очевидно, что мы получили совершенно неклассическое свойство, присущее микромиру – частица может пройти через потенциальный барьер, имея недостаточно для этого энергии ‒ **туннелировать** через барьер, и вероятность этого события описывается выражением (3.27). В пределе малой вероятности туннелирования, когда

,

из (3.27) можно получить приближенное равенство

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.29 в) |

### Замечание 4

Как видно из рисунка 3.7, частица в квантовой механике «чувствует» потенциальный барьер, даже пролетая над ним. Разберёмся, почему на этом графике имеется ряд локальных максимумов, где T=1. Оказывается, при энергиях и т.д., больших , реализуются условия, когда сдвиг фазы для частицы, проходящей в области барьера путь туда и обратно, равный , становится кратным . Для каждого из таких максимумов волны, отражённые от стенок барьера *х=*0 и *х=a*, интерферируют и гасят друг друга. При этом внутри барьера затухания нет, так как – мнимая, в результате частица не испытывает отражение от барьера.

В этом случае потенциальный барьер по своему действию напоминает оптический интерферометр Фабри – Перо, в котором происходит многократное отражение света между двумя зеркалами.

## § 3.6. Инфинитное движение в поле прямоугольной потенциальной ямы

Мы подробно рассмотрели **финитное** движение (т.е. движение в ограниченной области пространства) частицы в потенциальной яме. Это движение происходит при определенных значениях энергии частицы E, превышающей величину потенциального барьера .

Рассмотрим теперь движение частицы над потенциальным барьером. Эволюция состояния в этом случае полностью определяется уравнением Шрёдингера

|  |  |
| --- | --- |
|  | (\*) |

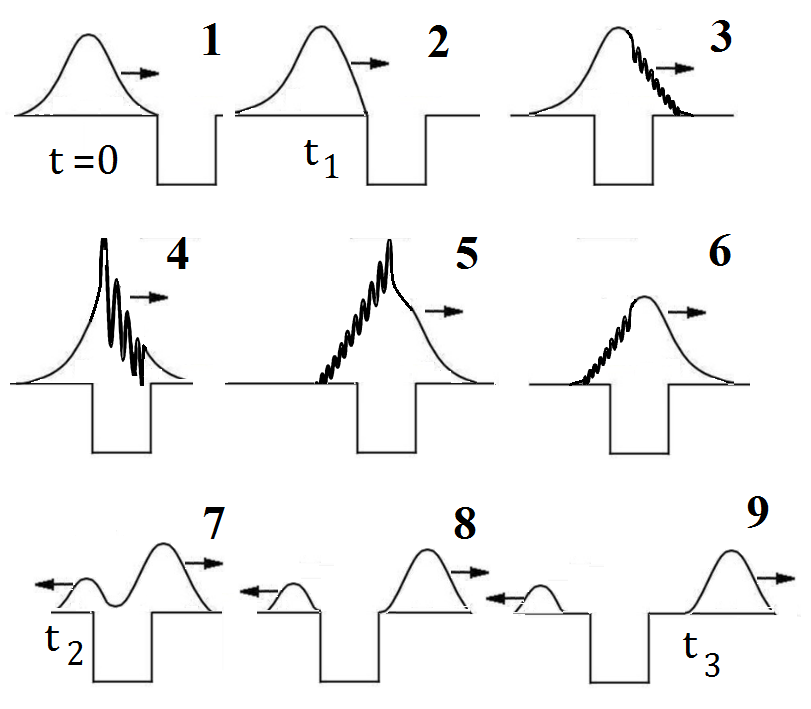
Задав и подставив её в уравнение Шрёдингера, получим эволюцию во времени.

На самом деле даже для прямоугольной ямы решать уравнение (\*) с произвольного вида функцией надо аналитически, с помощью компьютерного анализа. Приведем результаты численного моделирования в некоторые характерные моменты времени.

На рис. 3.8 изображена плотность координатного распределения . При частица начинает двигаться, приближаясь к яме.

При 0<t<, происходит свободное движение **волнового пакета[[5]](#footnote-5)**. Для него волновую функцию можно записать в следующем виде:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (3.30) |



*Рис. 3.8.* Трансформация профиля волнового пакета   
при прохождении потенциальной ямы. Численный эксперимент

При этом происходит его постепенное расплывание, за которое отвечает величина σ в первом экспоненциальном множителе. При t= пакет входит в область взаимодействия с ямой. В результате к моменту t=   
пакет «раздваивается». Одна часть пакета двигается в начальном направлении, а вторая как бы отражается от ямы. Примечательно, что оба эти пакета и есть одна частица – она как бы «размазывается» по двум пакетам.

К моменту t= оба пакета расходятся достаточно далеко, чтобы считаться свободными. В этом случае также можно ввести понятие коэффициента отражения R и прохождения T, R+T=1.

При фиксированной ширине ямы , т.е. если

. Отметим, что в классике это соотношение при выполняется строго.

## § 3.7. Гармонический осциллятор

**Гармоническим осциллятором** называется частица массы *M*, совершающая одномерное движение в потенциальном поле. Сейчас мы будем решать задачу о собственных значениях и собственных функциях энергии для одномерного квантового гармонического осциллятора.

Идеализированный гармонический осциллятор – это точечная масса, прикрепленная к идеальной пружине при полном отсутствии трения и других сил. Идеализация заключается ещё и в том, что возвращающая сила такой пружины прямо пропорциональна её удлинению. В квантовой механике существует широкий класс физических явлений, в которых приходится иметь дело с теорией гармонического квантового осциллятора (например, квантовая теория мод электромагнитного излучения, колебания кристаллической решетки твёрдого тела, электрические колебания радиотехнического RLC-контура).

Прежде чем заняться теорией гармонического осциллятора, поговорим подробно о понятии чётности.

### 3.7.1. Чётность

Рассмотрим уравнение Шрёдингера:

.

Пусть потенциальная функция симметрична относительно преобразований инверсии:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (3.31) |

Тогда будет справедливо уравнение Шрёдингера вида

.

Таким образом, является собственной функцией того же самого гамильтониана , что и функция .

Предположим, что функции невырождены и выполняется равенство

|  |  |
| --- | --- |
| , | (3.32) |

где некоторое число.

Введём теперь в рассмотрение оператор чётности , который совершает над преобразование инверсии:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.33) |

Тогда (3.32) можно переписать в виде , или

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.34) |

Итак, если т.е. остается инвариантной при преобразовании инверсии, то говорят, что обладает **чётной четностью**. Если же , , то обладает **нечётной чётностью**.

### 3.7.2. Решение задачи о гармоническом осцилляторе

Итак, стационарное уравнение Шрёдингера для одномерного гармонического осциллятора с потенциальной энергией , где *x* ‒ растяжение пружины или отклонение частицы от положения равновесия, с возвращающей силой *F=-kx,* имеет вид

.

Можно упростить запись, сделав замену: ‒ частота осциллятора.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.35) |

Здесь удобно вместо координаты *x* ввести безразмерный параметр

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.36) |

Тогда после подстановки получим

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.37) |

Если выполняется условие , получаем простое уравнение

,

которое имеет асимптотические интегралы

.

Дифференцирование этой функции и пренебрежение членами более низкого порядка даёт . Однако, поскольку граничные условия требуют равенства нулю волновой функции на бесконечности ‒   
, ‒ нужно сделать вывод о нефизичности положительной экспоненты.

Таким образом, получаем решение (3.37) в общем виде:

.

Для функции путём подстановки получаем уравнение

,

где введено обозначение

.

Понятно, что если E>0, то . Ограниченность приводит к тому, что может расти на , но не быстрее, чем показательная функция с конечной степенью ). Такие решения существуют только при целых неотрицательных значениях *n*, включая ноль:

здесь – полином Эрмита:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.38) |

Определяя постоянные так, чтобы удовлетворяли условию нормировки , получим

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.39) |

Понятно, что для основного (нормального) состояния c n=0 решение уравнения Шрёдингера запишется в виде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.40) |

Энергия *n*-го cостояния гармонического осциллятора представляется очень простой формулой

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.41) |

Из (3.41) видно, что квантовый гармонический осциллятор, даже находясь в основном состоянии с n=0, обладает отличной от нуля энергией . Заметим, что классический гармонический осциллятор должен был бы скатиться на самое дно потенциальной ямы и перестать двигаться. Однако в квантовой механике это означало бы, что частица локализовалась в точке с определённым импульсом p=0, что нарушило бы принцип неопределённости.

Зарисуем теперь на рис. 3.9 волновые функции (сплошные линии), (пунктир), а также распределение вероятности для классического гармонического осциллятора (штрихпунктирные линии).

Вертикальные линии ‒ границы движения классического осциллятора.

.

Нулевая функция ‒ основное состояние с n=0 и энергией   
.

Первая функция , для которой n=1,

Вторая с n=2 и .

Таким образом, квантовый осциллятор имеет некоторые максимумы вероятности нахождения (области локализации), в то время как классический осциллятор имеет такие области только вблизи границ движения. Кроме этого, квантовый гармонический осциллятор выходит за эти границы движения.

### Замечание 1

Можно отметить следующие отличия энергетического спектра квантового осциллятора от классического:

1. Энергетический спектр квантового осциллятора является дискретным, т.е. в отличие от классического случая частица не может иметь произвольные значения энергии;

2. Энергия основного состояния квантового осциллятора отлична от нуля и равна ;

3. Энергия квантового осциллятора, в отличие от классического, зависит от частоты, а не от амплитуды, которая в квантовой теории вообще не определена.

|  |
| --- |
|  |
| *Рис. 3.9.* Вид волновых функций квантового гармонического осциллятора |

# ЛИТЕРАТУРА

1. **Львовский А. Отличная квантовая механика : учебное пособие / А. Львовский. – Ульяновск : АО «Первая образцовая типография», 2019. – 424 с.**
2. **Бондарев Б. В. Курс общей физики : в 3 кн. Книга 2: Электромагнетизм, оптика, квантовая физика : учебник для бакалавров / Б. В. Бондарев, Н. П. Калашников, Г. Г. Спирин. – 2-е изд. – М. : Юрайт, 2019. – 441 с. – (Бакалавр. Академический курс). – ISBN 978-5-9916-1754-3. – Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. – URL: https://urait.ru/bcode/425490.**
3. **Электродинамика** [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б. М. Кос­тишко, Ю. Ф. Наседкина, Р. В. Гурина ; УлГУ, ИФФВТ, Каф. физ. методов в прикл. исслед. – Электрон. текстовые дан. (1 файл : 7,56 Мб). – Ульяновск : УлГУ, 2017. – URL: http://lib.ulsu.ru/MegaPro/Download/ MObject/1178/Kostishko2017.pdf.
4. Квантовая оптика : учебно-методическое пособие к лабораторным работам / Ю. Ф. **Наседкина**, Б. М. Костишко ; УлГУ, ИФФВТ, Каф. физ. методов в прикл. исслед. – Ульяновск : УлГУ, 2017. – Загл. с экрана. – Электрон. текстовые дан. (1 файл : 3,28 МБ). – Текст : электронный. – URL: http://lib.ulsu.ru/ProtectedView/Book/ViewBook/914.
5. Ермаков А. И. Квантовая механика и квантовая химия : в 2 ч. Часть 1. Квантовая механика : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. – М. : Юрайт, 2020. – 183 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-00127-3. – Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. – URL: https://urait.ru/bcode/452844.
6. Мусин Ю. Р. Физика: колебания, оптика, квантовая физика : учебное пособие для среднего профессионального образования / Ю. Р. Мусин. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Юрайт, 2020. – 329 с. – (Профессиональное образование). – ISBN 978-5-534-03540-7. – Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. – URL: https://urait.ru/bcode/449189.
7. Физика. Словарь-справочник : в 2 ч. Часть 1 : справочник для вузов / Е. С. Платунов, В. А. Самолетов, С. Е. Буравой, С. С. Прошкин. –   
   2-е изд., стер. – М. : Юрайт, 2019. – 379 с. – (Университеты России). – ISBN 978-5-534-01789-2. – Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. – URL: https://www.biblio-online.ru/bcode/434086.
8. Перельман Я. И.Занимательная физика : в 2 кн. Книга 1 / Я. И. Перельман. – М. : Юрайт, 2019. – 192 с. – (Открытая наука). – ISBN 978-5-534-07255-6. – Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. – URL: https://www.biblio-online.ru/bcode/438277.
9. Перельман Я. И.Занимательная физика : в 2 кн. Книга 2 / Я. И. Пе­рельман. – М. : Юрайт, 2019. – 242 с. – (Открытая наука). – ISBN 978-5-534-07257-0. – Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. – URL: https://www.biblio-online.ru/bcode/438507.

# ПРИЛОЖЕНИЯ

## Приложение 1

## Нобелевские премии по физике и химии, связанные с квантовой теорией

* 1904 – Уильям Рамзай (химия) – в том числе за получение и идентификацию гелия. Газ был идентифицирован по линейчатым спектрам поглощения, совпадающим с характерными линиями поглощения в излучении Солнца, обнаруженными ранее (Локьер, Жансен, ок. 1870).
* 1906 – Джозеф Джон Томсон – признание выдающегося вклада его теоретических и экспериментальных исследований электропровод­ности газов. Одно из этих исследований привело к открытию электрона и, таким образом, открыло вопрос об установлении внутренней структуры атома.
* 1911 – Вильгельм Вин – за открытие законов, описывающих тепловое излучение. Задача об излучении абсолютно твёрдого тела рассматривалась многими выдающимися учёными того времени (Кирхгоф, Рэлей, Больцман). Полностью эта задача может быть решена только методами квантовой физики (что и сделал М. Планк).
* 1918 – Макс Карл Эрнст Людвиг Планк – за открытие кванта энергии. Точная труднопереводимая формулировка: "in recognition of the services he rendered to the advancement of Physics by his discovery of energy   
  quanta".
* 1919 – Иохан Штарк – в том числе за открытие расщепления спектральных линий в электрическом поле. Эффект Штарка был объяснен квантовой механикой.
* 1920 – Вальтер Герман Нернст (по химии) – в признание его работ в области термохимии. В частности, за открытие теоремы Нернста или третьего начала термодинамики, описывающего поведение материи вблизи абсолютного нуля и объяснимого только в рамках квантовой теории.
* 1921 – Альберт Эйнштейн – за достижения в области теоретической физики и в особенности за открытие закона фотоэффекта.
* 1922 – Нильс Хенрик Давид Бор – за достижения в изучении структуры атомов и испускаемого ими излучения.
* 1923 – Роберт Эндрю Милликен – за определение элементарного заряда и работы в области фотоэффекта. Интересно, что целью опытов Милликена по фотоэффекту было опровержение гипотез Эйнштейна и Планка и «восстановление в правах» классической максвелловской электродинамики. Однако его опыты были выполнены настолько точно, что без всяких сомнений подтвердили эти гипотезы. В речи при представлении лауреата председатель Нобелевского комитета профессор А. Гуллстранд сказал: «Если бы опыты Милликена дали другой результат, закон фотоэффекта Эйнштейна оказался бы пустым, а теория Бора не получила бы такой опоры. После появления результатов Милликена оба они были удостоены Нобелевской премии».
* 1924 – Карл Манне Георг Зигбан – за открытия и исследования в области рентгеновской спектроскопии. Его исследования рентгеновских спектров позволили связать рентгеновское излучение с переходами электронов между внутренними оболочками атомов и таким образом внесли вклад в обоснование теории Бора.
* 1925 – Джеймс Франк и Густав Людвиг Герц (в равных долях) – за открытие законов, определяющих столкновения электронов и атомов. С появлением теории Бора задача о столкновении атома и частицы перестала быть задачей классической механики, так как атом может поглощать только вполне определённые порции энергии, соответствующие переходу электрона между некоторыми уровнями. В своей речи при представлении лауреата член Нобелевского комитета профессор С.В. Озеен сказал: «Посредством разработанного лауреатами метода, при их личном участии получен большой материал, касающийся столкновений между электронами и различными объектами. Хотя полученные результаты важны и сами по себе, более важным в настоящий момент является заключение о том, что гипотеза Бора о различных состояниях атома и связь между этими состояниями и излучением по результатам этих измерений полностью соответствует реальности».
* 1927 – Артур Холли Комптон (1/2 премии) – за открытие эффекта Комптона. Эффект Комптона – это рассеяние фотона на электроне, при котором проявляются корпускулярные свойства излучения. Мы рассмотрим его позднее.
* 1929 – Луи де Бройль (герцог Луи-Виктор Пьер Раймонд де Бройль). За открытие волновой природы электрона.
* 1930 – Шандрасехара Венката Раман. За работы по изучению рассеяния света и открытие эффекта Рамана. Эффект Рамана или комбинационное рассеяние света был одновременно и независимо открыт советскими физиками Л.И. Мандельштамом и Г.С. Ландсбергом. Он проявляется в том, что при рассеянии света в среде возможны процессы, когда поглощённый и переизлучённый фотоны имеют несколько разную частоту. Разность этих частот соответствует энергии возбуждения центра рассеяния (например, молекул среды).
* 1932 – Вернер Карл Гейзенберг. За создание квантовой механики, применение которой привело, в числе прочего, к открытию аллотропных форм водорода.
* 1933 – Эрвин Шредингер и Поль Адриен Морис Дирак (в равных долях). За открытие новых продуктивных представлений атомной теории. Основные уравнения нерелятивистской и релятивистской квантовой физики называются уравнениями Шредингера и Дирака, соответственно.
* 1937 – Клинтон Йозеф Дависсон и Джордж Пагет Томсон (в равных долях). За экспериментальное открытие дифракции электронов на кристалле.
* 1943 – Отто Штерн. За вклад в развитие метода молекулярных лучей и открытие магнитного момента протона. Эта работа связана с понятием спина элементарной частицы – специальной квантовой характеристики собственного момента вращения частицы. Полученный результат, известный как опыт Штерна – Герлаха, заключается в том, что при прохождении узкого пучка частиц (ионов) через область с неоднородным магнитным полем пучок не уширяется, как предсказывает классическая теория, а разбивается на несколько (в зависимости от вида частиц) узких пучков. Этот эффект непосредственно связан с не имеющими классического аналога правилами квантования момента вращения, о которых мы вкратце поговорим, когда будем обсуждать строение атома.
* 1945 – Вольфганг Паули. За открытие принципа исключения, также называемого принципом Паули.
* 1954 – Макс Борн (1/2 премии). За фундаментальный вклад в развитие квантовой механики и, в особенности, за статистическую интерпретацию волновой функции.
* 1955 – Виллис Эжен Лэмб, за открытие тонкой структуры спектра атома водорода, и Поликарп Куш, за точное определение магнитного момента электрона (в равных долях). Оба результат связаны с проявлением релятивистских эффектов и были позднее объяснены в рамках релятивистской квантовой теории – квантовой электродинамики. С магнитным моментом электрона связан один из самых точных случаев совпадения теории и эксперимента.
* К этому времени квантовая теория уже полностью принята и не вызывает сомнений, её методы применяются во многих областях физики. Так, вся физика конденсированного состояния опирается на квантовую теорию: это и теория металлов, и сверхпроводимость, и физика полупроводников. В физике элементарных частиц, естественно, царит квантовая физика. Поэтому далее перечислим только наиболее яркие открытия, или открытия связанные с советскими или российскими учёными.
* 1962 – Лев Давидович Ландау, за разработку передовых теорий в области физики конденсированных сред и, в особенности, жидкого гелия. Сверхтекучее состояние гелия является одним из макроскопических квантовых эффектов.
* 1964 – Чарльз Хард Таунс (1/2 премии), Николай Генадьевич Басов (1/4 премии) и Александр Михайлович Прохоров (1/4 премии), за фундаментальные работы в области квантовой электроники, приведшие к созданию генераторов и усилителей работающих на принципе мазера и лазера.
* 1965 – Шин-Итиро Томонага, Джулиан Швингер, Ричард Фейнман, за фундаментальный вклад в квантовую электродинамику. В частности, ими были объяснены аномалии в собственном магнитном моменте электрона, за обнаружение которых была присуждена Нобелевская премия по физике 1955 года.
* 1972 – Джон Бардин, Леон Нейл Купер, Джон Роберт Шрифер (в равных долях). За разработку теории сверхпроводимости, обычно называемой теорией БКШ.
* 1973 – Лео Есаки (1/4 премии) и Ивар Гиавер (1/4 премии), за экспериментальное обнаружение эффекта туннелирования в полупроводниках и сверхпроводниках, и Брайан Давид Джозефсон (1/2 премии), за теоретическое предсказание свойств тока сверхпроводимости через туннельный барьер и в особенности за совокупность явлений, называемую эффектом Джозефсона. Туннельный эффект – это особенная форма «движения», не имеющая аналогов в классической физике. В результате туннелирования, например, электрон может перескочить («протуннелировать») из проводника в проводник через слой диэлектрика (туннельный барьер). На этом эффекте, например, работают туннельные микроскопы, позволяющие изучать поверхность с атомным разрешением.
* 1978 – Пётр Леонидович Капица (1/2 премии), за изобретения и открытия в области физики низких температур, Арно Аллан Пенциас и Роберт Вудро Вилсон (по 1/4 премии), за открытие реликтового космического излучения. Открытие Капицы – это в первую очередь открытие сверхтекучести гелия. Сверхтекучесть гелия это уникальное, квантовое, макроскопическое явление, теория которого была создана Л.Д. Ландау. Реликтовое излучение тоже связано с квантовой физикой, так как спектр этого излучения является спектром абсолютно чёрного тела с температурой около 2К.
* 1985 – Клаус фон Клитцинг, за открытие квантового эффекта Холла.
* 1994 – Бертрам Н. Брокхауз и Клиффорд Г. Шул (в равных долях), за пионерский вклад в развитие техники рассеяния нейтронов при исследовании конденсированных сред. Нейтроны проявляют волновые свойства, как и электроны. Поэтому при облучении кристалла нейтронами возникает дифракция. В силу малой длины волны и некоторых особенностей взаимодействия нейтронов с веществом, это даёт в руки исследователя мощный инструмент для изучения свойств вещества.
* 1996 – Дэвид М. Ли, Дуглас Д. Ошероф, Роберт С. Ричардсон ( в равных долях), за открытие сверхтекучести гелия . В изотопе гелия-3 на один нейтрон меньше, чем в обычном . Поэтому свойства этих двух изотопов сильно отличаются: гелий-4 оказывается бозоном (подчиняется статистике Бозе), а гелий-3 оказывается фермионом (подчиняется статистике Ферми). Поэтому сверхтекучее состояние гелия-3 существенно отличается от аналогичного состояния гелия-4.
* 2003 – Алексей А. Абрикосов, Виталий Лазаревич Гинзбург, Энтони Дж. Леггет (в равных долях), за пионерский вклад в теорию сверхтекучести и сверхпроводимости.

## Приложение 2

Физическое образование в вузах, Т. 21, № 3, 2015 19

УДК 530.1.:535.1.:535.4

## О ПРИРОДЕ ФОТОНА

*Олег Николаевич Крохин*

Москва, Россия, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Москва, Россия, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»;

e-mail: [ONKrokhin@mephi.ru](mailto:ONKrokhin@mephi.ru)

*Анализируется вопрос о природе фотона. Фотон является релятивистской частицей с массой покоя, равной нулю и скоростью, равной скорости света с. Фотон можно рассматривать как частицу, имеющую размер порядка длины волны, и которая локализована внутри «пакета». Размер «пакета» определяется временем излучения t, те. длина «пакета»-сt. Ключевые слова: фотон, скорость света, размер фотона, световой пакет, интерференция одиночных фотонов.*

В последние годы в связи с развитием техники генерации оптического высококогерентного излучения вновь стал актуальным вопрос о природе фотона, т.е. что представляет собой квант электромагнитного излучения. Этому вопросу посвящены многочисленные публикации, эксперименты и теоретические исследования [1, 2].

Исторически, фотон как частица с конечной энергией был введён М. Планком в 1900 г. для объяснения спектра излучения «чёрного тела» в области больших частот , интенсивность которого экспоненциально уменьшается с увеличением частоты. Это обстоятельство очень важно, поскольку оно сразу позволяет установить размер области локализации энергии и, следовательно, материального носителя её – электромагнитного поля. Переходя от частоты к пространственной координате получаем, что пространственная область концентрации энергии равна длине волны , где с – скорость света, т.е.

где р – импульс фотона, равный . (1)

Соотношение (1) напоминает соотношение неопределённостей в квантовой физике, но здесь оно более конкретно, т.е. определяет размер области, в которой локализовано электромагнитное поле, т.е. размер фотона «продольном» направлении (равный длине волны излучения). Подчеркнём, что это следует непосредственно из экспериментальных работ и каким-то образом объясняет «пороговый» характер энергии фотона.

Понятие об уравнении Шредингера для фотона введено в [3, 4]. Если следовать логике, развитой в [3], то можно написать для волнового уравнения следующее соотношение в случае, если мы имеем плоскую волну, распространяющуюся вдоль оси x:

=0 (2)

Ясно, что первая и вторая скобка соответствуют разным направлениям движения, т.е. они эквивалентны и поэтому достаточно написать:

. (3)

Это уравнение может рассматриваться как уравнение Шредингера. Это особенно очевидно, если его умножить на постоянную Планка ћ. Здесь возникает важный вопрос, что следует подразумевать под символом ? Поле или волновую функцию – амплитуду вероятности? Правильный ответ: по-видимому, обе эти величины, что неудивительно, поскольку фотон – чисто волновое образование.



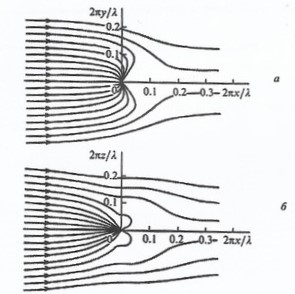
Так что мы имеем два одинаковых уравнения: одно для материальной среды – поля; другое для ψ функции, которая определяет движение частицы-фотона. Ответ на этот вопрос надо искать в дуализме волна-частица. Там, где стоит символ Е, уравнение описывает материальную составляющую, т.е. частицу фотон, который возник из-за локализации поля в некоторой области пространства или, другими словами, согласно С. Вайнбергу «квантовые поля собираются в пакеты, или кванты, которые наблюдаются в лабораториях как элементарные частицы» [5].

Остаётся ещё один вопрос: если элементарная частица – это трёхмерное образование, то чему равен «поперечный» размер фотона? Он может быть установлен непосредственным измерением, а именно, он определяется эффективным сечением взаимодействия фотона с объектом, способным его поглотить, которым является атомный диполь (он же и излучает фотон), размер которого значительно меньше, чем поперечный размер фотона. Частота колебаний этого диполя должна быть резонансной с фотоном, а свойства этого диполя определяться квантовым состояние атома.

Такая задача была решена Р. Фишером и Х. Полем. Её перевод на русский язык опубликован в [6]. В этой постановке плоская монохроматическая электромагнитная волна падает на квантовый диполь и возбуждает его переход с нижнего уровня на резонансный с полем волны верхний уровень. Величина амплитуды колебаний этого диполя достигает максимума в момент времени t – Т/4, где Т время полного цикла перехода в верхнее, а затем в нижнее (индуцировано) состояние, определяемое частотой Раби , где матричный элемент дипольного момента перехода,   
Ео амплитуда электромагнитной волны, .

В процессе перехода диполь сам является источником появления в его окрестности электромагнитного поля той же частоты, и в результате интерференции этого поля с полем падающей волны изменяется характер потока энергии электромагнитной волны вблизи диполя, в том числе учитывающий, что часть падающего потока поглощается диполем. Это наглядно показано на рис. 1 из [6]. В данном случае предполагается, что поле линейно поляризовано по оси z. Фотон имеет круговую поляризацию, поэтому будет представлять собой среднее из суммы двух потоков, изображенных на рис. 1. Таким образом, оказывается, что линейный поперечный размер фотона сравним с длиной волны.

Какие практические выводы следуют из вышесказанного? Главное следствие заключается в том, что несмотря на относительно небольшие размеры фотона-элементарной частицы (порядка λ) его волновая функция, определяемая процессом его излучения, имеет весьма большую протяжённость в пространстве, значительно превышающую длину волны и определяемую фактически длиной когерентности. Это означает, что все операционные системы, основанные на использовании фотонов («фотоника») будут чрезвычайно медленными.



*Рис. 1.* а) Линии потока энергии в плоскостях х, у, б) линии потока энергии в плоскости х, z. Диполь, находящийся в начале координат осциллирует вдоль оси z. Слева на него падает линейно поляризованная вдоль оси z монохроматическая плоская волна.

С другой стороны, системы, основанные на использовании электронов, оказываются значительно более быстрыми. В первом и втором случаях причина одинакова: скорость обработки и передачи информации ограничивается квантовой физикой. У фотона при сравнимых с электроном энергиях она начинает играть роль раньше, поскольку импульс фотона значительно меньше импульса электрона, вследствие наличия у электрона массы покоя. А из этого следует, что согласно соотношению неопределённости при одинаковых энергиях электрон имеет более высокую степень локализации, чем фотон, он более «классичен». Поэтому известный «закон Мура», который описывает прогресс в росте скорости обработки информации в электронике, перестанет работать, когда вследствие уменьшения размеров электронных устройств электрон станет квантовым. Одновременно мы видим, что интернет, который основан на оптических линиях связи, является весьма скоростным. Но он основан на классическом свете!

### Литература

1. The Nature of Light. What is photon? Ed. by CRC Press, Taylor and Francis Group/ Boca Raton, London, N.Y.,2008.
2. The Quantum Challenge. George Greenstein, Arthur G. Zajons. Jones and Barlet Publishhers Inc. 2006.
3. *А.И. Ахиезер, И.Б. Берестецкий*. Квантовая электродинамика. ГИФМЛ, Москва, 1957.
4. *В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский*. Квантовая электродинамика. Физматлит, Москва, 2006.
5. St. Weinberg, http://sceptic-radio.narod.ru/po/kn5/htm. Перевод на русский язык: “В защиту науки”, №11, Москва, Наука, 2012.
6. *Х. Поль, Р. Фишер*. УФН, 141,376(1983).

## Приложение 3

## Каков размер фотона? Фотон как волновой цуг

*На основе материала**из книги Зисман Г.А. , Тодес О.М. Курс общей физики. Часть III. Оптика. Физика атома и атомного ядра. Киев : Эдельвейс». – 1994. – С. 65-66.*

Естественные источники света испускают поток некогерентных волн. Обычно такими источниками являются сильно нагретые тела (Солнце, нить накала электрической лампочки). Естественные источники состоят из миллиард хаотически вспыхивающих и потухающих излучателей – атомов и молекул. Каждый атом испускает излучение независимо от других атомов.

С классической волновой точки зрения каждую такую порцию излучения следует рассматривать как последовательность («цуг») волн, испускаемых за время порядка 10-8 с.

Цуг волн, испускаемый отдельным атомом, имеет конечную протяжённость вдоль луча. При продолжительности испускания t = 10-8 с и скорости света *с* = 3 108 м/с эта протяжённость порядка



L = с t = 3 108 м/с 10-8 с = 3 м.



Это и есть «размер» фотона вдоль луча.

Поэтому интерференция от естественного источника света возможна лишь при не слишком больших разностях хода, до тех пор, пока она меньше L. Такой цуг волн при частоте порядка 10 15 Гц содержит N=10-8 10 15 = 107 волн, то есть в высокой степени монохроматичен. Иными словами, такой цуг имеет фиксированную частоту (длину волны) и начальную фазу и в нём содержится определённое количество длин волн.



Например, для фиолетового света длиной волны λ = 0,3 мкм = 3 10-7 м количество «штук» N длин волн в цуге равно:



N = L / λ = 3 м : 3.8 10-7 м ̴ 107 (штук).



Для цуга красного света длиной волны λ = 0, 6 мкм = 6 10-7 м количество «штук» длин волн в нём равно:



N = 3 м : 6 10-7 м = 0,5 107 = 5 106 (штук).



С высокой степенью точности волновой цуг монохроматичен и когерентен.

При излучении атомы испускают ежесекундно миллиарды волновых цугов, имеющих разные частоты, амплитуды и начальные фазы. Разности фаз между отдельными цугами хаотически изменяются. В любой точке пространства эти волновые цуги накладываются, образуя суперпозицию из *взаимно некогерентных волн.*

1. Сайт нобелевского комитета. Список нобелевских лауреатов по физике. http://nobelprize.org/nobel\_prizes/physics/laureates/ [↑](#footnote-ref-1)
2. Сайт нобелевского комитета. Список нобелевских лауреатов по химии. http://nobelprize.org/nobel\_prizes/chemistry/laureates/ [↑](#footnote-ref-2)
3. Louis de Broglie, Quanta de lumiere, diffraction et interferences. Compt. Rend. 177, 548 (1923). [↑](#footnote-ref-3)
4. Описание Лабораторной работы 4 «Изучение спектра атома водорода и определение постоянной Ридберга». [↑](#footnote-ref-4)
5. Строго монохроматическая волна, которую мы рассматривали до сих пор, – это состояние экзотическое, таких волн в природе нет. Согласно теореме Фурье, функцию, отличную от нуля в некоторой ограниченной области пространства и равную нулю во всем остальном пространстве, можно построить как суперпозицию синусоидальных функций. Это и есть **волновой пакет.** [↑](#footnote-ref-5)