

Министерство образования и науки Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)

Кафедра общей физики

Осташев В.Б.

Часть IX

Физика микромира:
Квантовая оптика. Квантовая механика

Конспект лекций

Санкт-Петербург

2024

УДК _____

[Осташев В.Б.](#) «Часть IX. Физика микромира: Квантовая оптика. Квантовая механика»: Конспект лекций. СПбГТИ(ТУ). СПб, 2024,– 150 с.



В лекциях рассмотрены ...,

...
...
...
...
...
...
...

Лекции соответствуют следующим компетенциям подготовки специалистов всех направлений: ОК-1, ОК-3, ОК-6, ПК-3, ПК-4, ПК-10.

Рис. __, табл. __, библиогр. 4 назв.

Рецензент:

...

Утверждено на заседании методического Совета _____
факультета СПбГТИ(ТУ).

Протокол № __, «__»._____.20__г.

Часть IX. Физика микромира: Квантовая оптика. Квантовая механика

Содержание

1. Законы излучения абсолютно чёрного тела	5
1.1. Вводные определения	5
1.2. Абсолютно чёрное тело	7
1.3. Закон Кирхгофа.....	9
1.4. Схема построения квантовой механики.....	12
1.5. Закон Стефана-Больцмана	14
1.6. Закон Вина.....	16
1.7. Формула Рэлея-Джинса.....	19
1.7.1. Формула Рэлея-Джинса и схема доказательства.....	19
1.7.2. Вывод формулы Рэлея-Джинса	19
1.7.3. Ультрафиолетовая катастрофа.....	29
1.8. Формула Планка	30
1.8.1. Гипотеза Планка.....	31
1.8.2. Распределение Планка	35
2. Квантовая оптика.....	39
2.1. Фотоэффект	39
2.2. Корпускулярная теория света.....	47
2.2.1. Импульс фотона	47
2.2.2. Давление света.....	51
2.3. Экспериментальное подтверждение квантовой природы света.....	54
2.3.1. Комptonовское рассеивание.....	54
2.3.2. Ультрафиолетовая граница тормозного рентгеновского излучения	59
2.3.3. Опыт Боте	60
3. Квантовая механика	62
3.1. Гипотеза де Бройля.....	63
3.1.1. Волна де Бройля	63
3.1.2. Экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля	66
3.1.3. Сравнительное рассмотрение дифракции света и электрона	70
3.2. Волновая функция	71
3.2.1. Понятие волновой функции.....	71
3.2.2. Физический смысл Ψ -функции	72
3.2.3. Свойства Ψ -функции.....	73
3.3. Краткая теория операторов.....	75
3.4. Уравнение Шредингера	80
3.4.1. Общий вид (не стационарное уравнение).....	80
3.4.2. Стационарное уравнение Шредингера	84
3.5. Принципы квантовой механики	88
3.5.1. Простейший подход и наводящие соображения.....	88
3.5.2. Собственные значения энергии и волновой функции.....	91

3.5.3.	Собственные значения оператора и собственные вектора	92
3.5.4.	«Наблюдаемые» и «чистые состояния».....	96
3.5.5.	Свойство суперпозиции волновой функции.....	97
3.6.	Классические задачи на решение уравнения Шредингера	98
3.6.1.	Частица в одномерной, бесконечно глубокой потенциальной яме	98
3.6.2.	Прохождение частицы через потенциальный барьер.....	103
3.6.3.	Гармонический осциллятор	110
3.7.	Принцип неопределенности Гейзенберга	112
3.8.	Момент импульса и энергия вращательного движения	119
3.8.1.	Квантование момента импульса.....	119
3.8.2.	Жесткий ротатор	126
4.	Атом водорода	129
4.1.	Уравнение Бальмера.....	129
4.2.	Строение атома водорода	131
4.2.1.	Атом водорода по Бору	131
4.2.2.	Атом водорода по Шредингеру	133
4.2.3.	Связь формулы Бальмера со строением атома	143
4.3.	Спектр атома водорода	144
	Литература.....	147

1. Законы излучения абсолютно чёрного тела (тепловое излучение)

1.1. Вводные определения

Df 1. *Тепловым излучением* называется электромагнитное излучение, испускаемое за счет внутренней энергии вещества, т.е. за счет кинетической энергии движения атомов, молекул, ионов. Это единственный вид излучения, которое находится в термодинамическом равновесии с телом. Все остальные виды излучения относятся к люминесценции – флуоресценция, фосфоресценция, хемилюминесценция, и т.д. (учебник...). На самом деле «всё, что не тепловое излучение» – это «холодное свечение» к которому, помимо люминесценции, относятся комбинационное рассеяние, излучение Вавилова-Черенкова, тормозное излучение заряженных частиц (в частности, тормозное рентгеновское излучение) и пр. Но пока мы не будем концентрировать на этом внимание. С люминесценцией и рядом подобных явлений мы познакомимся в последующих главах. Излучение Вавилова-Черенкова было уже рассмотрено в разделе «Оптика».

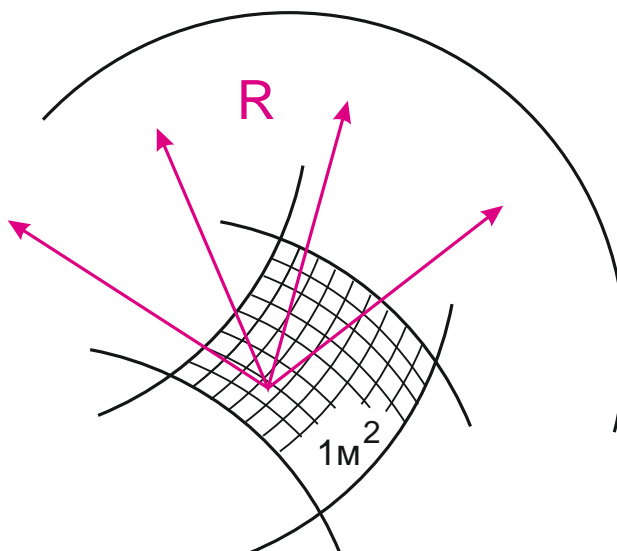


Рисунок 1.1

Энергетическая светимость

Df 2. *Энергетическая светимость* – энергия, излучаемая телом во всех направлениях с единицы поверхности в единицу времени.

$$R = \frac{W}{St} = \frac{N}{S}, \quad (1.1)$$

где

W – энергия излучения,

N – мощность.

Df 3.1. *Лучеиспускательная способность (испускательная способность, спектральная плотность энергетической светимости)* – излучение энергии происходит во всем спектральном диапазоне на всех

частотах. Однако количество энергии, излучаемой на разных частотах, не одинаково. Можно показать, что **количество энергии** (энергетическая светимость) **излучения небольшого диапазона частот $d\omega$ пропорционально величине этого диапазона**. Коэффициент пропорциональности называется **лучеиспускательной способностью**.

Лучеиспускательная способность:

$$\begin{aligned} dR_{[\omega;\omega+d\omega]} &\sim d\omega \Rightarrow \\ dR_{\omega} &= r_{\omega} d\omega \end{aligned} \quad (1.2)$$

$$\begin{aligned} dR_{[\lambda;\lambda+d\lambda]} &\sim d\lambda \Rightarrow \\ dR_{\lambda} &= r_{\lambda} d\lambda \end{aligned} \quad (1.3)$$

Немного преобразовав оба выражения (поделив правую и левую части на $d\omega$ и $d\lambda$ соответственно), получаем:

$$r_{\omega} = \frac{dR}{d\omega}, \quad (1.4)$$

$$r_{\lambda} = \frac{dR}{d\lambda}. \quad (1.5)$$

Отсюда второе определение:

Df 3.2. r_{ω} , r_{λ} – лучеиспускательная способность есть **спектральная плотность энергетической светимости**.

Лучеиспускательная способность есть **плотность энергетической светимости по спектру**. Мы можем считать её как **плотность по циклической частоте**, так и как **плотность по длине волны**. Сейчас мы покажем переход между этими двумя величинами и в дальнейшем будем использовать только r_{ω} .

Найдём дифференциал длины волны:

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega} \Rightarrow d\lambda = d\left(\frac{2\pi c}{\omega}\right) = -\frac{2\pi c}{\omega^2} d\omega$$

– здесь, в отличие от теории дисперсии мы используем не фазовую скорость света, а скорость света в вакууме. А это в любом случае константа.

Тогда

$$\begin{aligned} r_{\lambda} &= \frac{dR}{d\lambda} = \frac{dR}{\left(\frac{2\pi c}{\omega^2} d\omega\right)} = \frac{dR}{\left(\frac{2\pi c}{\omega^2}\right) d\omega} = \\ &= \frac{\omega^2}{2\pi c} \frac{dR}{d\omega} = \frac{\omega^2}{2\pi c} r_{\omega}, \end{aligned}$$

$$r_\lambda = \frac{\omega^2}{2\pi c} r_\omega, \quad r_\omega = \frac{2\pi c}{\omega^2} r_\lambda.$$

Теперь перейдём от частоты в коэффициенте к длине волны (*чтобы иметь все возможные выражения*):

$$r_\lambda = \frac{\omega^2}{2\pi c} r_\omega = \frac{\left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^2}{2\pi c} r_\omega = \frac{(2\pi c)^2}{2\pi c \lambda^2} r_\omega = \frac{2\pi c}{\lambda^2} r_\omega.$$

Окончательно:

$$r_\lambda = \frac{2\pi c}{\lambda^2} r_\omega = \frac{\omega^2}{2\pi c} r_\omega, \quad (1.6)$$

$$r_\omega = \frac{\lambda^2}{2\pi c} r_\lambda = \frac{2\pi c}{\omega^2} r_\lambda. \quad (1.7)$$

Замечание: $r_\omega = r(\omega)$ – спектр излучения. Данная функция частоты (которая, как мы выясним позже, может зависеть от температуры, как от параметра) есть зависимость интенсивности излучения от частоты (или длины волны, при соответствующем индексе). То есть, эта функция и есть **спектр излучения тела**.

Df 4. **Лучепоглощательная способность** – это отношение поглощенной энергии к падающей на тело энергией в диапазоне $[\omega; \omega + d\omega]$

$$a_\omega = \frac{W'[\omega; \omega + d\omega]}{W[\omega; \omega + d\omega]}. \quad (1.8)$$

1.2. Абсолютно чёрное тело

Df. **Абсолютно чёрное тело (АЧТ)** – тело, поглощающее всё падающее на него излучение. Его лучепоглощательная способность есть тождественная единица:

$$a_\omega \equiv 1.$$

Здесь и ниже все величины и параметры, относящиеся к АЧТ мы будем обозначать верхним индексом звёздочка – «*»:

- R^* – энергетическая светимость АЧТ,
- r_ω^* – лучеиспускающая способность АЧТ (по частоте),
- r_λ^* – лучеиспускающая способность АЧТ (по длине волны)
- $a_\omega^* \equiv 1$ – лучепоглощательная способность.

Абсолютно чёрных тел в природе не существует. Существуют системы, свойства которых приближаются к свойствам АЧТ. В технике широко используются *модели АЧТ*. Бытовой моделью АЧТ является открытое окно в доме напротив. Когда там не горит свет нам кажется, что в комнате абсолютно темно, хотя для обитателей этого помещения может вполне хватать свете. Свет, попавший в комнату через окно, многократно отражается от стен, при этом поглощаясь стенами. Таким образом, из окна наружу не выйдет практически ни одного упавшего на него луча.

В технике используются модели АЧТ. В первом приближении это достаточно большая полость с малым входным отверстием. Внутри эта полость покрывается веществом хорошо поглощающем в большей части спектра (либо в большей части *интересующей нас части спектра* – дело в том, что привычная нам чёрная сажа имеет не такие уж идеальные характеристики поглощения в области ИК-спектра, где в нормальных условиях излучается и поглощается большая часть энергии; с другой стороны серовато-серебристый оксид магния имеет там гораздо более привлекательную характеристику).

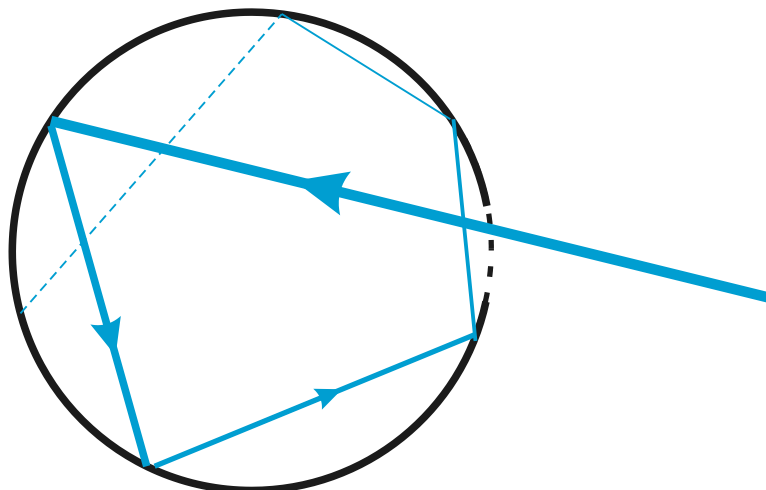


Рисунок 1.2
Модель АЧТ (идеализированная)

На практике используются более примитивные модели в виде закрытой диафрагмой конусообразной воронки.

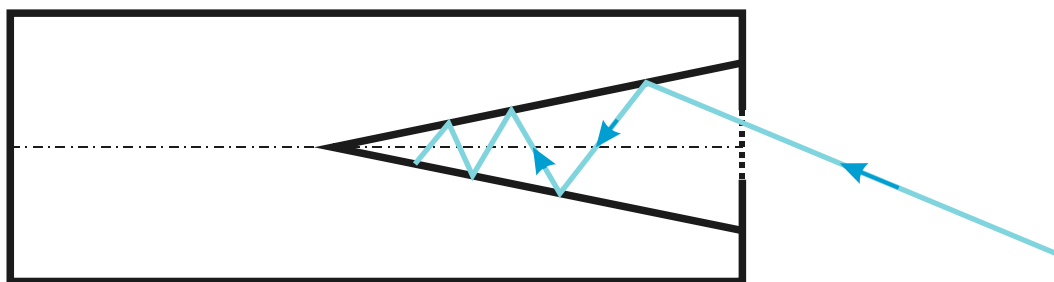


Рисунок 1.3
Реальный технический вариант модели АЧТ.

Плазма является в объектом, высокой степени приближающемся к АЧТ. Дело в том, что плазма поглощает *всё взаимодействующее с ней электромагнитное излучение*. Таким образом, звёзды и пламя в очень хорошей степени будут соответствовать одеде АЧТ.

Надо отметить, что, как мы покажем ниже, свойства АЧТ не сводятся только к способности поглощать всё упавшее на него излучение. Главное их свойство – спектр их излучения будет очень близко повторять спектр излучения АЧТ (*Планковский спектр*) и может быть использован, как эталон при определении связи энергетической светимости или максимума длины волны излучения с температурой самого тела.

1.3. Закон Кирхгофа

Закон Кирхгофа: *Отношение лучеиспускательной способности тела к его лучепоглощательной способности не зависит от природы тела, а является универсальной функцией частоты и температуры.*

$$\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} = r_{\omega,T}^* = f(\omega,T) \quad (1.9)$$

Выведем это соотношение:

Пусть в некотором вакуумированном объёме (*возможно, заполненном другими телами*) установилось термодинамическое равновесие. В этом случае все поверхности, находящиеся в этом объёме, дабы не потерять и не приобрести лишнюю температуру, будут излучать ровно столько, сколько и поглощать.

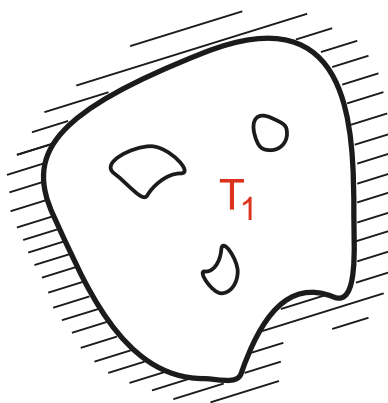


Рисунок 1.4

Вакуумированная полость с абсолютно чёрными стенками в состоянии термодинамического равновесия при температуре T_1 .

При этом, поскольку тепловое излучение находится в термодинамическом равновесии со всей системой, для него будут определены его параметры состояния. И, в частности, поскольку тепловое излучение тоже находится в термодинамическом равновесии со всеми телами системы, объёмная плотность энергии электромагнитного поля будет иметь определённое значение для всех точек свободного пространства данного объёма:

$$w = \frac{W}{V}$$

– определена для термодинамической системы.

Очевидно, что при этом на любую поверхность любого тела (*в расчёте на единицу площади в единицу времени*) будет падать одна и та же энергия. Обозначим её, как:

$$j_{\Sigma} = \frac{W_T}{St}$$

– энергия электромагнитного излучения, падающая на единицу поверхности тела в единицу времени со всех сторон.

Почему j_{Σ} ? Ну, во-первых, судя по единицам измерения, эта величина сродни плотности потока энергии. Она и есть суммарная плотность всех потоков лучистой энергии, движущихся через данную точку во всех направлениях. Ниже, в ходе другого доказательства, мы покажем, что она равна $j_{\Sigma} = \frac{cw_T}{4}$.

Для того, чтобы тело находилось в термодинамическом равновесии, то есть не охлаждалось и не нагревалось, оно должно излучать ровно столько лучистой энергии, сколько и поглощает. Условие поглощения единицей поверхности и излучения одного и того же количества энергии будет выглядеть следующим образом:

$$R_T = aj_{\Sigma T}$$

или

$$\frac{R_T}{a_T} = j_{\Sigma T},$$

где

$a = \frac{W'}{W}$ – коэффициент поглощения, отношение энергии, поглощённой телом, ко всей энергии, упавшей на тело.

И тогда для двух разных тел системы имеем:

$$\frac{R_T^1}{a_T^1} = \frac{R_T^2}{a_T^2}.$$

Теперь пусть две соседние вакуумированные камеры, находясь в состоянии термодинамического равновесия, соединены каналом, по которому может проходить электромагнитное излучение только определённых длин волн: в диапазоне $[\omega; \omega + d\omega]$.

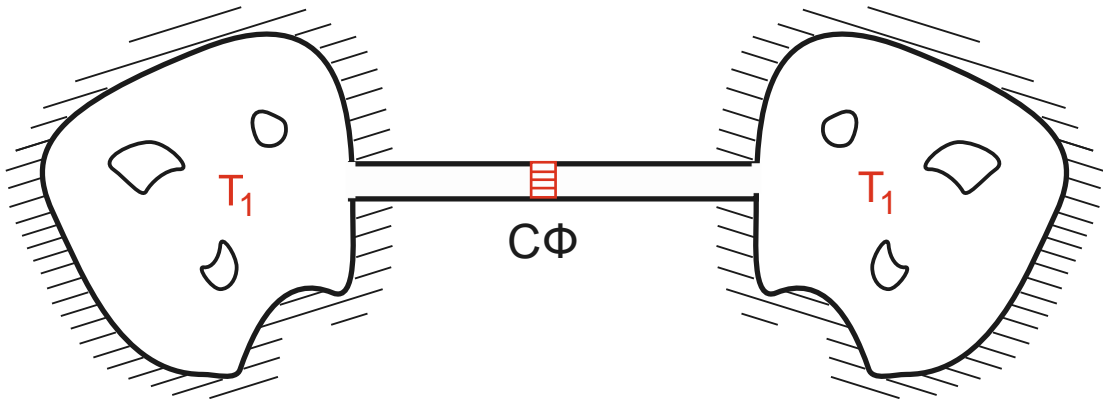


Рисунок 1.5

Термодинамическое равновесия двух вакуумированных полостей, соединенных тоннелем.

СФ – частотный фильтр (*светофильтр*) с полосой пропускания $[\omega, \omega + d\omega]$.

Тогда для двух тел, находящихся в первой и во второй камерах имеем:

$$\frac{R_{T[\omega, \omega + d\omega]}^1}{a_{T[\omega, \omega + d\omega]}^1} = \frac{R_{T[\omega, \omega + d\omega]}^2}{a_{T[\omega, \omega + d\omega]}^2}.$$

Но, тогда, вспоминая предыдущие определения:

$$\left. \begin{aligned} dR_{T[\omega, \omega + d\omega]} &= r_{\omega T} d\omega \\ a_{T[\omega, \omega + d\omega]} &= a_{\omega T} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{dR_{T[\omega, \omega + d\omega]}}{a_{T[\omega, \omega + d\omega]}} = \frac{r_{\omega T} d\omega}{a_{\omega T}}$$

$$\Rightarrow \frac{r_{\omega T}^1 \cancel{d\omega}}{a_{\omega T}^1} = \frac{r_{\omega T}^2 \cancel{d\omega}}{a_{\omega T}^2},$$

$$\frac{r_{\omega T}^1}{a_{\omega T}^1} = \frac{r_{\omega T}^2}{a_{\omega T}^2}.$$

И далее из постоянства отношения лучеиспускательной и лучепоглощательной способности тела делаем необходимый нам вывод:

$$\frac{r_{\omega T}}{a_{\omega T}} = const \left| \begin{array}{l} T = const \\ \omega = const \end{array} \right. \Rightarrow \frac{r_{\omega T}}{a_{\omega T}} = f(\omega, T).$$

$$a_{\omega T} \equiv 1 \Rightarrow \frac{r_{\omega T}^*}{a_{\omega T}^*} = \frac{r_{\omega T}^*}{1} = r_{\omega T}^* = f(\omega, T).$$

Физический смысл закона Кирхгофа. Их в первом приближении, можно определить два:

1. Следуя закону Кирхгофа можно сделать вывод, что чёрное тело будет не только нагреваться, но и остывать быстрее.

Представитель африканской расы замёрзнет быстрее в наших климатических условиях, чем европеец ☺.

2. **Спектр излучения абсолютно чёрного тела** (АЧТ) и, вообще говоря, любого тела, с точностью до нормировки на коэффициент поглощения, универсален для всех тел, **есть некая универсальная функция**. Забытая на плите чугунная сковорода будет светиться так же, как далёкая звезда. Вопрос только в температуре, до которой её разогреть. Спектр излучения тал универсален и описывается универсальной функцией. Вопрос только в аналитическом выражении этой «универсальной функции». Закон не отвечает на данный вопрос.

1.4. Схема построения квантовой механики

Можно показать (*и, наверное, здесь и сейчас это действительно важно!*), как развивалась наука на грани рождения принципиально нового направления – *квантовой механики*, какие научные открытия являлись толчком каких последующих выводов и поисков дальнейших решений. Приведём логическую схему развития науки в этот период.

Временные рамки первого периода (*материал раздела «Тепловое излучение»*):

Пьер Прево	1809 (<i>эмпирическое правило</i>)
– теория теплового обмена радиацией	
Закон Кирхгофа	1859
Закон Стефана-Больцмана:	
Стефан	1879
Больцман	1884
Закон Вина	1893-1894
Закон Релея-Джинса	
Релей	1900
Джинс	1905 (<i>более подробно</i>)
Закон Планка	1900 (<i>гипотеза</i>)
Эйнштейн – уравнение фотоэффекта	1905
Де Бройль – длина волны частицы	1924 (<i>гипотеза</i>)
Уравнение Шредингера	1926
Борн, Вернер, Гейзенберг	1927
– копенгагенская трактовка	

Итак:

1. Закон Кирхгофа – спектр излучения чёрного тела, как и спектр излучения любого тела (*с точностью до коэффициента отражения*) есть универсальная функция частоты и температуры. Первый вопрос, который задаёт себе и автору закона *научное сообщество* – «напишите аналитическое выражение этой функции». Закон не отвечает на этот вопрос, он лишь принципиально определяет сам момент. Что остаётся

- делать бедным учёным? ☺ Направить все усилия на поиски этого аналитического выражения искомой функции...
2. Закон Стефана-Больцмана (*энергетическая светимость АЧТ пропорциональна 4-ой степени его термодинамической температуры*) – он не даёт ответ на поставленный вопрос, однако позволяет утверждать, что функция, во-первых, имеет ограниченный интеграл, и, во-вторых, этот интеграл имеет конкретное значение. Первое – это серьёзно сужает класс искомых функций. Второе – даёт мощный критерий проверки правильности найденного результата. Третье – одно бесплатное дополнение, возможность рассчитать температуру тела по яркости его свечения (*широко применяется в технике по сей день*).
 3. Закон Вина (*искомая универсальная функция может быть представлена, как 4-я степень частоты на другую универсальную функцию отношения частоты и температуры*) – закон опять не приводит аналитическое выражение искомой функции, однако сильно сужает класс поиска и даёт ещё более мощный критерий проверки. Бесплатное дополнение – цветовая температура, возможность рассчитывать температуру тела по цвету (*максимуму длины волны*) излучения.
 4. Закон Рэлея-Джинса – есть первый и единственный вариант выражения искомой функции в принятии всех догм классической физики. Результат великолепно совпадает в экспериментом в ИК-области спектра, неплохо в видимой и катастрофически расходится в области ультрафиолета – «Ультрафиолетовая катастрофа». Тело должно мгновенно терять всю свою энергию и остывать до нуля за счёт излучения в коротковолновой части спектра – *найденная функция бесконечно растёт с увеличением частоты*.
 5. Макс Планк спасает мир от этой катастрофы! ☺ Планку удаётся получить другой вид функции, которая *совпадает с экспериментом во всех частях спектра*. Причём формула Рэлея-Джинса есть её приближение при малых значениях аргумента (*частоты*). Однако для этого Планку приходится сделать чудовищное предположение – электромагнитная волна должна излучаться не непрерывно, а порциями. Причём величина порции (*её энергия*) должна быть пропорциональна частоте. Тогда к процессу излучения можно применить формулу распределения Больцмана по энергиям и всё обретает совсем другую окраску. Макс Планк до конца своих дней так и не принял идеи *квантовой механики*. Он считал, что это свойство – есть свойство излучателей, расположенных на поверхности тела и никак не относится к свойствам волны.
 6. При выводе уравнения фотоэффекта Альберт Эйнштейн (*за это уравнение он получил свою первую и единственную Нобелевскую Премию*) предположил, что высказанная Планком гипотеза есть следствия не свойства излучателей, а *свойства самой*

электромагнитной волны. Электромагнитная волна не есть суть непрерывная субстанция, а сама состоит из мельчайших составляющих – порций, квантов. И далее, с электромагнитной волной может быть связан поток частиц. Причём она, эта волна в ряде случаев ведёт себя как волна, а в ряде случаев, как поток частиц.

7. Де Бройль развил идею Эйнштейна и выдвинул гипотезу, что в таком случае и с любой движущейся частицей можно связать волну. В качестве отправной точки де Бройль взял формулу для связи импульса фотона с волновым числом электромагнитной волны и предложил выражение для длины волны связанной с движущейся частицей (*длина волны де Бройля*). К гипотезе и вообще самой идее никто не отнёсся сколько-нибудь серьёзно, но проведённые вскоре (*по-видимому, достаточно случайно* 😊) эксперименты внезапно обнаружили, что поток электронов испытывает дифракцию на кристалле никеля. Причём, длина волны, полученная из предположения, что период дифракционной решётки равен межатомному расстоянию, очень хорошо совпадает с длиной волны, предсказанной де Бройлем.
8. Шредингер пишет уравнения, решением которого для случая свободного движения микрочастицы (*стационарное решение в отсутствии потенциальных полей*) должна являться **волна де Бройля**.
9. Развитие дальнейших попыток объяснения происходящего привело к возникновению *матричной механики* Гейзенберга (*подход чисто с точки зрения теории вероятностей и математической статистики*) и *волновой механики* Шредингера (*попытка честно написать искомое волновое уравнение*). Написание Шредингером своего уравнения и его трактовка в рамках теории Гейзенберга показали, что данная наука уже не может быть осознана в классическом смысле. Что создаваемая теория является, прежде всего, математическим аппаратом, результаты вычислений с применением которого дают точное совпадение с экспериментом. И что прямая трактовка и осознание «происходящего в данной науке» на «бытовом уровне» просто невозможна. Копенгагенская трактовка – *волновая функция*, как и все *квантово-механические явления*, может иметь только **вероятностную трактовку** и не имеет никакого иного физического смысла (*не могут быть объяснены через какой-либо детерминированный подход*). Последнее получило название **Копенгагенской трактовки** или **Копенгагенского подхода**. Далее к ней добавляется **операторный подход**, являющийся непосредственным следствием матричной механики.

1.5. Закон Стефана-Больцмана

Закон сначала был экспериментально открыт Польским учёным Стефаном, и позднее опровергнут более точными измерениями. Однако позже Больцман теоретически подтвердил сделанное предположение,

добавив, что оно верно только для абсолютно чёрного тела (АЧТ). Для *серых* же тел, на которых проводились эксперименты, нужен дополнительный поправочный коэффициент – *степень черноты*.

Закон Стефана-Больцмана: энергетическая светимость абсолютно черного тела пропорциональна четвертой степени термодинамической температуры:

$$R^* = \sigma T^4 \quad \text{– для абсолютно черного тела.} \quad (1.10)$$

$$R = a\sigma T^4 \quad \text{– для серых тел,} \quad (1.11)$$

где

a – степень черноты, $0 < a < 1$,

$\sigma = 5.670367 \cdot 10^{-8}$ Вт/м²·К⁴ – постоянная Стефана-Больцмана.

Из определения лучеиспускательной способности и закона Кирхгофа можно получить следующие выражения:

$$r_\omega = \frac{dR}{d\omega} \Rightarrow R = \int_0^\infty r_\omega d\omega \quad (1.12)$$

и

$$r_\omega^* = \frac{dR^*}{d\omega} \Rightarrow R^* = \int_0^\infty r_\omega^* d\omega, \quad (1.13)$$

где

$r_\omega^* = f(\omega, T)$ – лучеиспускательная способность АЧТ,

универсальная функция частоты и температуры закона Кирхгофа.

Тогда данный закон представляется следующим образом:

$$R^* = \int_0^\infty r_{\omega, T}^* d\omega = \int_0^\infty f(\omega, T) d\omega = \sigma T^4, \quad (1.14)$$

$$R = \int_0^\infty a r_{\omega, T} d\omega = a\sigma T^4. \quad (1.15)$$

В итоге удалось определить критерий оценки (*проверки*) для искомой функции и точное значение её интеграла по всей области определения. Однако, сама искомая *функция частоты и температуры* так и не найдена...

Кроме того, из данного закона следует и некое прямое техническое приложение – возможность оценки температуры по энергетической светимости тела (*то есть по яркости свечения*).

Яркостная температура – температура, определённая по яркости свечения (исходя из закона Кирхгофа):

$$R^* = \sigma T^4 \Rightarrow T = \sqrt[4]{\frac{R^*}{\sigma}} \text{ – яркостная температура.}$$

Либо, если известна степень черноты:

$$T_y = \sqrt[4]{\frac{R}{a\sigma}} \quad (1.16)$$

1.6. Закон Вина

Вин привлёк дополнительную информацию из теории электричества и смог доказать, что искомая универсальная функция частоты и температуры может быть выражена, как третья степень частоты, умноженная на другую универсальную функцию уже отношения частоты к температуре. Иначе, если вынести за скобки куб частоты, оставшуюся функцию можно свести к функции одной переменной, введя новую переменную, равную отношению частоты и температуры.

И так, **закон Вина**:

$$r_{\omega,T}^* = f(\omega, T) = \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right). \quad (1.17)$$

В итоге найден гораздо более мощный критерий проверки для искомой функции – класс функций, где мы будем искать наш *универсальный спектр*, гораздо сузился! Однако есть и два бесплатных (*почти*) практических приложения данной теории – оказывается теперь можно определить максимум данной функции, даже не зная её точного виде!!! Это утверждение называется *закон смещения Вина*.

Произведём эти вычисления:

Вычислим искомую функцию в выражении через длину волны и температуру:

$$\left. \begin{array}{l} r_{\omega} = \frac{2\pi c}{\lambda^2} r_{\lambda} \\ r_{\omega T}^* = f(\omega, T) \end{array} \right\} \Rightarrow f(\omega, T) = \varphi(\lambda, T) = \frac{2\pi c}{\lambda^2} f\left(\frac{2\pi c}{\lambda}, T\right),$$

$$\left. \begin{array}{l} f(\omega, T) = \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right) \\ \varphi(\lambda, T) = \frac{2\pi c}{\lambda^2} f\left(\frac{2\pi c}{\lambda}, T\right) \end{array} \right\} \Rightarrow \varphi(\lambda, T) = \frac{2\pi c}{\lambda^2} \cdot \left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^3 \cdot F\left(\frac{2\pi c}{\lambda T}\right).$$

Тогда её можно записать, как:

$$\begin{aligned}\varphi(\lambda, T) &= \frac{2\pi c}{\lambda^2} \cdot \left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^3 \cdot F\left(\frac{2\pi c}{\lambda T}\right) = \frac{(2\pi c)^4}{\lambda^5} \cdot F\left(\frac{2\pi c}{\lambda T}\right) = \\ &= \frac{(2\pi c)^4}{\lambda^5} \cdot F\left(2\pi c \cdot \frac{1}{(\lambda T)}\right) = \frac{1}{\lambda^5} \cdot \phi(\lambda T),\end{aligned}$$

где

$$\phi(x) = F\left(2\pi c \cdot \frac{1}{(x)}\right).$$

Теперь возьмём производную от этой функции:

$$\begin{aligned}\frac{d\varphi}{d\lambda} &= d\left(\frac{1}{\lambda^5} \phi(\lambda T)\right) / d\lambda = \\ &= \frac{1}{\lambda^5} \cdot \frac{d\phi(\lambda T)}{d\lambda} \cdot \frac{d(\lambda T)}{d\lambda} - \frac{5}{\lambda^6} \phi(\lambda T) = \\ &= \frac{1}{\lambda^5} T \frac{d\phi(\lambda T)}{d\lambda} - \frac{5}{\lambda^6} \phi(\lambda T) = \\ &= \frac{5}{\lambda^6} \left(\lambda T \frac{d\phi(\lambda T)}{d\lambda} - 5\phi(\lambda T)\right) = \frac{5}{\lambda^6} \left(\xi \frac{d\phi(\xi)}{d\xi} - 5\phi(\xi)\right), \\ &\quad \xi = \lambda T.\end{aligned}$$

В итоге:

$$\frac{d\varphi}{d\lambda} = \frac{5}{\lambda^6} \left(\xi \frac{d\phi(\xi)}{d\xi} - 5\phi(\xi)\right) = \frac{1}{\lambda^6} \Psi(\xi).$$

Максимум (то есть экстремум функции) определяется из условия равенства нулю её первой производной:

$$\begin{aligned}\max_{\lambda} : \frac{d\varphi}{d\lambda} = 0 &\Rightarrow \frac{1}{\lambda^6} \Psi(\xi) \Big|_{\lambda = \lambda_{\max}} = 0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{1}{\lambda^6} \Psi(\xi) = \frac{1}{\lambda^6} \Psi(\lambda_{\max} T) = 0.\end{aligned}$$

Из решения этого уравнения и принимая во внимание, что из экспериментов известно, что искомая длина волны максимума лучеиспускательной способности не равна бесконечности, вычисляем искомую величину (важно, что такое решение существует, а конкретное значение параметра b , в принципе, можно определить экспериментально):

$$\lambda_{\max} T = b.$$

И, поделив правую и левую части уравнения на термодинамическую температуру, получаем:

$$\lambda_{\max} = \frac{b}{T}.$$

В итоге:

$$\lambda_{\max} = \frac{b}{T}. \quad (1.18)$$

– длина волны для максимального значения энергетической светимости r_{ω} .

где

$$b = 2.898 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}.$$

Так же, подставляя полученное решение в исходную функцию (в выражении через длину волны), **можно показать, что:**

$$r_{\max} = cT^5, \quad (1.19)$$

где

$$c = 1.30 \cdot 10^{-5} \text{ Вт}/(\text{м}^3 \cdot \text{К}^5).$$

Из данных формул можно вычислить температуру, определяемую максимумом светимости тела, то есть *цветом его свечения*:

$$T_{\text{цв}} = \frac{b}{\lambda_{\max}}. \quad (1.20)$$

Эта температура называется **цветовой температурой**.

Из того факта, что в природе излучающие тела являются серыми, а не абсолютно чёрными, реальная температура будет чуть больше яркостной (*мы не учитываем степень черноты a – на самом деле излучается меньше, чем должно для чёрного тела, и вычисляемая температура оказывается меньше реальной*) и чуть меньше цветовой (*для серого тела максимум чуть сместится в коротковолновую область*). В итоге соотношение для яркостной, цветовой и реальной температур имеет вид:

$$T_{\text{я}} < T < T_{\text{цв}}.$$

1.7. Формула Рэля-Джинса

1.7.1. Формула Рэля-Джинса и схема доказательства

Рэлей, а позднее более точно Джинс, используя термодинамику и классическую теорию электромагнетизма, вывели формулу, которая должна была описывать искомую универсальную функцию частоты и температуры Кирхгофа (*она же лучеиспускательная способность АЧТ*):

$$r_{\omega,T}^* = f(\omega, T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT. \quad (1.21)$$

Позднее оказалось, что она хорошо соответствует эксперименту в инфракрасной области, но резко расходится с действительностью в области ультрафиолета.

1. Свяжем лучеиспускательную способность АЧТ с объёмноспектральной плотностью энергии в замкнутой вакуумированной полости с абсолютно чёрными стенами:

$$f(\omega, T) = r_{\omega,T}^* = \frac{c w'(\omega, T)}{4}. \quad (1.22)$$

2. Вычислим число стоячих волн в единице объёма и через него выразим объёмноспектральную плотность энергии, как число стоячих волн, умноженное на энергию одной стоячей волны:

$$w'(\omega, T) = \frac{\omega^2}{2\pi^2 c^3} \langle \varepsilon \rangle. \quad (1.23)$$

3. Получим выражение для искомой функции, подставив второе выражение в первое:

$$f(\omega, T) = \frac{\omega^2}{8\pi^2 c^2} \langle \varepsilon \rangle. \quad (1.24)$$

4. Выведем окончательную формулу, предположив, что на один вид энергии (*электрического и магнитного полей*) одной плоскости поляризации (*их две, перпендикулярных друг другу*) приходится по

$$\frac{1}{2} kT.$$

(*На хорошо и отлично желательно знать конкретный вывод по пункту 3 и обязательно всё конкретику по пункту 4*)

1.7.2. Вывод формулы Рэля-Джинса

Рассмотрим замкнутую вакуумированную полость с абсолютно чёрными стенками (*стенки – АЧТ*) в которой установилось термодинамическое равновесие.

1. Сначала выведем соотношение между лучеиспускательной способностью АЧТ и объёмно-спектральной плотностью энергии электромагнитного поля:

$$r_{\omega T} = \frac{c}{4} w'_{\omega T},$$

где

$w'_{\omega T}$ – спектральная плотность объёмной плотностью энергии электромагнитного поля (*объёмно-спектральная плотность энергии*),

c – скорость света.

Для этого вспомним, что вектор плотности потока энергии (*вектор Умова*)

$$\vec{j} = \frac{W}{S_{\perp} dt} \vec{n}$$

связан с объёмной плотностью энергии w следующим соотношением (*это было в общей колебаний и волн, «Плотность потока электромагнитного поля, Вектор Умова-Пойнтинга»*):

$$\vec{j} = w \vec{c}.$$

Причём, нам здесь важна *абсолютная величина*.

Напомним. Для плотности потока энергии волны (*вектор Умова*) имеем

$$\begin{aligned} j &= \frac{dW}{S_{\perp} dt} = \frac{dW}{S_{\perp} dt} \cdot \frac{dx}{dx} = \frac{dW dx}{S_{\perp} dt dx} = \\ &= \frac{dW dx}{S_{\perp} dx dt} = \underbrace{\frac{dW}{dV}}_w \cdot \underbrace{\frac{dx}{dt}}_v = wv \end{aligned}$$

$$\frac{dx}{dt} = v \quad \text{– скорость,}$$

$$S dx = dV \quad \text{– элементарный объем,}$$

$$w = \frac{dW}{dV} \quad \text{– объёмная плотность энергии,}$$

$$\vec{v} \uparrow \uparrow \vec{n} \quad \text{– параллельно направлению распространения.}$$

Тогда

$$\vec{j} = w \vec{v}$$

И, беря по абсолютной величине и учитывая, что скорость равна скорости свет в вакууме, получаем:

$$\underbrace{j = vw}_{j=cw}, \quad v \equiv c.$$

Далее вычислим плотность *потока энергии в расчёте на единичный телесный угол*: в отличии от течения реки, несколько волн может одновременно проходить через данную точку в разных направлениях. Если

считать, что в условиях термодинамического равновесия волны распространяются от всех точек всех поверхностей, причём во всех направлениях, то через любую точку пространства будут одновременно проходить волны всех возможных направлений. Тогда в пределах телесного угла $d\Omega$ будет распространяться поток энергии с плотностью потока

$$dj = \frac{cw}{4\pi} d\Omega.$$

Пусть через данную точку проходят две волны.

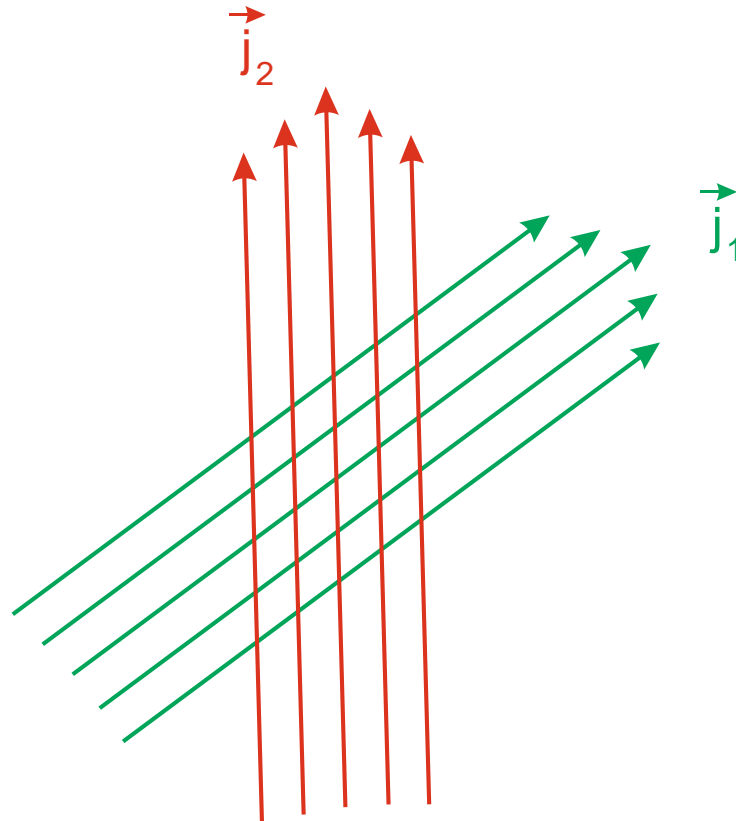


Рисунок 1.6
Суммирование плотностей потока

Тогда суммарная плотность потока энергии этих волн будет

$$\left. \begin{aligned} j_1 &= w_1 c \\ j_2 &= w_2 c \\ j_\Sigma &= j_1 + j_2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow j_\Sigma = j_1 + j_2 = w_1 c + w_2 c = \underbrace{(w_1 + w_2)}_w c = wc,$$

где

$w = \frac{W}{V}$ – объёмная плотность энергии всего электромагнитного поля (суммарного поля) в данной точке.

Тогда для N волн, проходящих через данную точку:

$$j_{\Sigma} = \sum_{i=1}^N j_i = \sum_{i=1}^N w_i c = \underbrace{\left(\sum_{i=1}^N w_i \right)}_w c = wc .$$

Таким образом, если через данную точку проходит не одна волна, а множество волн во всех возможных направлениях, причём равновероятно, соотношение между плотностью потока энергии и объёмной плотностью энергии не изменится:

$$\bar{j} = wc .$$

Тогда в расчёте на единичный телесный угол будет приходиться плотность потока

$$j_{\Omega} = \frac{cw}{4\pi} ,$$

а не телесный угол $d\Omega$ – плотность потока:

$$dj_{\Omega} = \frac{cw}{4\pi} d\Omega .$$

Теперь можем вернуть элементарной плотности потока значок вектора, так как в пределах элементарного телесного угла поток имеет практически одно направление.

$$\overline{dj}_{\Omega} = \frac{cw}{4\pi} \bar{n} d\Omega$$

Напомним: телесным углом называется часть пространства, которая является объединением всех лучей, исходящих из данной точки и пересекающих некоторую сферическую поверхность с центром сферы в точке, из которой исходят эти лучи. Измеряется телесный угол отношением площади этой сферической поверхности к квадрату радиуса сферы. В пределах элементарного телесного угла сферическую поверхность можно принять за плоскость, тогда \bar{n} – единичная нормаль к этой плоскости.

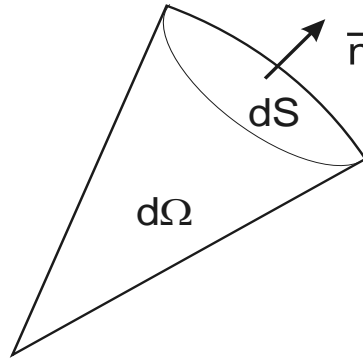


Рисунок 1.7

Вектор потока в пределах элементарного угла.

Из этого соотношения можно получить связь между потоком энергии с поверхности тела (в направлении верхней полусферы, геометрически) и объёмной плотностью энергии. Это соотношение будет иметь вид:

$$d\Phi = \frac{cw}{4} dS .$$

И, учитывая, что

$$R = \frac{W}{St} = \frac{\Phi}{S} \Rightarrow R = \frac{d\Phi}{dS} ,$$

получаем:

$$R^* = \frac{d\Phi}{dS} = \frac{cw}{4} ,$$

поскольку рассуждения о заполненности пространства электромагнитными волнами велось для условия, что стенки полости представляют собой АЧТ.

Окончательно имеем:

$$R^* = \frac{cw}{4} .$$

Конкретнее. Зададимся вопросом, какой поток энергии будут распространяться во все стороны пространства (*a* это верхняя полусфера, нижняя закрыта поверхностью) с поверхности, размером ΔS ? Для начала надо рассчитать поток энергии, распространяющейся в этого элемента поверхности в направлении телесного угла $d\Omega$, задаваемого нормалью \bar{n} (Рисунок 1.7). Его можно вычислить следующим образом:

$$d\Phi = \bar{j} \cdot \overline{dS} = \bar{j} \cdot \bar{n} dS = j \cos \vartheta dS ,$$

Здесь

$$\vartheta = \bar{j}, \bar{n}, \quad \bar{n} \perp dS, \quad |\bar{n}| = 1$$

В итоге:

$$d\Phi = dj_{\Omega} \cos \vartheta dS = \frac{cw}{4\pi} \cos \vartheta dS d\Omega .$$

В сферических координатах телесный угол представим, как:

$$d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi .$$

При этом для вычисления полного потока во все стороны с поверхности интегрировать наше выражение надо будет по половине полного телесного угла. То есть углы будут изменяться в следующих пределах:

$$\Omega = 2\pi \Rightarrow \vartheta \in \left[0; \frac{\pi}{2} \right], \quad \varphi \in [0; \pi] .$$

Напомним, что в сферических координатах, в отличие от декартовых, вектор задаётся проекциями на три взаимно перпендикулярные оси, вектор задаётся длиной (абсолютным значением, модулем) и двумя углами. Конкретнее:

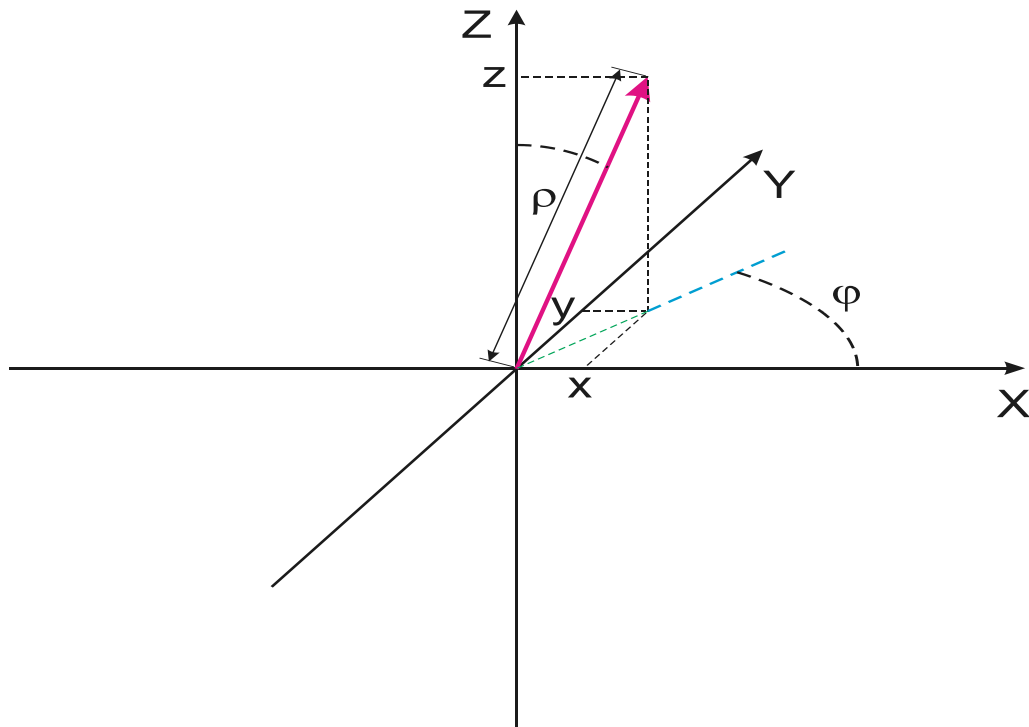


Рисунок 1.8
Сферические координаты

В нашем случае для верхней полусферы φ – полный угол в плоскости, параллельной излучающей поверхности ($= 2\pi$).

Тогда

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \Phi}{\partial S} dS &= \int_{2\pi} d\Phi = dS \cdot \int_{2\pi} \frac{cw}{4\pi} \cos \vartheta d\Omega = \\
 &= dS \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{cw}{4\pi} \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta = \\
 &= \frac{cw}{4\pi} dS \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin \vartheta d \sin \vartheta = \\
 &= \frac{cw}{4\pi} dS \cdot 2\pi \cdot \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin \vartheta d \sin \vartheta = \\
 &= \frac{cw}{4} dS \cdot 2 \cdot \left(\frac{1}{2} \sin^2 \vartheta \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} \right) = \frac{cw}{4} dS \cdot 2 \cdot \underbrace{\left(\frac{1}{2} \cdot 1^2 - \frac{1}{2} \cdot 0^2 \right)}_{\frac{1}{2}} = \\
 &= \frac{cw}{4} dS \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} = \frac{cw}{4} dS
 \end{aligned}$$

Окончательно:

$$\frac{d\Phi}{dS} = \frac{\frac{\partial\Phi}{\partial S} dS}{dS} = \frac{cw}{4}.$$

И так,

$$R^* = \frac{cw}{4}.$$

Теперь возьмём производную от полученного выражения по частоте и получим соотношение лучеиспускательной способности АЧТ и объёмноспектральной плотности энергии:

$$r_{\omega T}^* = \frac{dR^*}{d\omega} = \frac{d\left(\frac{cw}{4}\right)}{d\omega} = \frac{c}{4} \cdot \frac{dw}{d\omega} = \frac{cw'_{\omega T}}{4}.$$

Переходя от лучеиспускательной способности АЧТ к универсальной функции частоты и температуры Кирхгофа, получаем:

$$f(\omega, T) = r_{\omega T}^* = \frac{cw'_{\omega T}}{4},$$

где

$$w'_{\omega T} = w'(\omega, T),$$
$$f(\omega, T) = \frac{cw'(\omega, T)}{4}.$$

2. Теперь найдем другое выражение для $w'(\omega, T)$, выразив её через число стоячих волн в единице объёма и среднюю энергию одной стоячей волны.

Рэлей и Джинс предположили, что, если заменить идеально поглощающую поверхность на идеально отражающую, объёмная плотность электромагнитного поля изменится не должна. Это действительно так, потому, что и в том и в другом случае от поверхности излучается ровно столько энергии, сколько на неё упало – в случае отражения за счёт отражения (*энергия не поглощается*), а в случае АЧТ по закону Кирхгофа. В случае идеально отражающих стенок, поле можно рассматривать как совокупность стоячих волн. Будем искать совокупность стоячих волн – рассчитаем, сколько стоячих волн может образоваться в резонаторе в расчёте на тот или иной диапазон частот (в расчёте на диапазон частот $\Delta\omega$).

В резонаторе будут усиливаться волны длиной, попавшие в резонанс – то есть те, которые смогут образовать стоячую волну и справа и слева. В этом случае длина резонатора должна быть кратна «длине стоячей волны» (*мы говорили, что иногда используют такой термин*) – расстоянию между

двумя пучностями или двумя узлами. В этом случае в обеих точках отражения будут наблюдаться либо пучности, либо узлы, в зависимости от условий отражения.

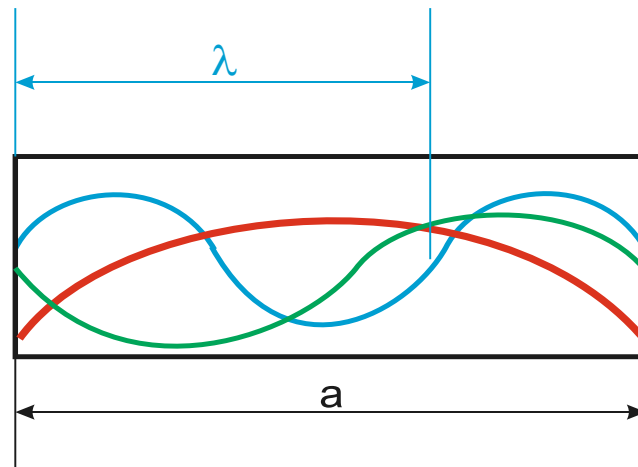


Рисунок 1.9
Стоячая волна в резонаторе

Вычислим, как соотносится длина резонатора и длина усиливающейся (резонирующей) волны:

$$a = m \frac{\lambda}{2}, \quad m \in \mathbb{N},$$

где

a – длина резонатора.

И далее, выражая через циклическую частоту:

$$\left. \begin{array}{l} a = m \frac{\lambda}{2} \\ \lambda = \frac{2\pi c}{\omega} \end{array} \right\} \Rightarrow a = m \frac{\cancel{2}\pi c}{\cancel{2}\omega} = \frac{\pi m c}{\omega}.$$

Тогда

$$m = \frac{\omega}{\pi c} a$$

– номер стоячей волны в выражении через частоту.

Но тогда в диапазоне частот $[\omega; \omega + \Delta\omega]$ уложится следующее количество стоячих волн:

$$N = \Delta m = \frac{\Delta\omega}{c\pi} a.$$

Или, переходя к элементарному диапазону частот:

$$dN = \frac{d\omega}{\pi c} \cdot a.$$

Напомним, что это одномерный случай (\mathbb{R}^1) и a – длина резонатора.

Можно показать (*мы опустим эти рассуждения*), что для двумерного случая (\mathbb{R}^2) формула будет иметь вид:

$$dN_{\omega} = \frac{\omega d\omega}{2\pi c^2} S,$$

$$S = a \cdot b.$$

В трёхмерном пространстве (\mathbb{R}^3) мы получим:

$$dN_{\omega} = \frac{\omega^2 d\omega}{2\pi^2 c^3} V$$

$$V = a \cdot b \cdot c,$$

Нас, естественно, интересует именно этот случай.

Можно заметить, что в одномерном случае искомая величина зависит от длины резонатора, в двумерном – от его площади, а в трёхмерном – от объёма. Но, тогда можно рассчитать объёмную плотность числа стоячих волн, приходящихся на диапазон частот $d\omega$:

$$dn_{\omega} = \frac{dN_{\omega}}{V}.$$

Он будет равен:

$$dn_{\omega} = \frac{dN_{\omega}}{V} = \frac{\omega^2 d\omega}{2\pi^2 c^3}.$$

Можно утверждать, что

$$w'(\omega, T) d\omega = \langle \varepsilon \rangle dn_{\omega},$$

где

$\langle \varepsilon \rangle$ – среднее значение энергии одной стоячей волны. Это можно пояснить так: объёмная плотность энергии, приходящейся на диапазон частот $d\omega$ с одной стороны равна объёмноспектральной плотности энергии (*поделили на величину диапазона $d\omega$*), умноженной на величину диапазона. С другой стороны она же будет равна числу стоячих волн в этом диапазоне, умноженному на количество стоячих волн в этом диапазоне. Это при условии, что, как и в резонаторе, вся энергия «растеклась» по отдельным резонансным частотам.

Подставим в только что полученный результат:

$$w'(\omega, T) \cancel{d\omega} = \langle \varepsilon \rangle \underbrace{\frac{\omega^2}{2\pi^2 c^3} \cancel{d\omega}}_{dn_{\omega}},$$

$$w'(\omega, T) = \langle \varepsilon \rangle \frac{\omega^2}{2\pi^2 c^3}.$$

3. Подставим в выражение для универсальной функции Кирхгофа через объёмноспектральную плотность энергии только что полученное выражение:

$$f(\omega, T) = \frac{c w'(\omega, T)}{4} = \frac{1}{4} \cdot \langle \varepsilon \rangle \frac{\omega^2}{2\pi^2 c^3} = \frac{\omega^2}{8\pi^2 c^2} \langle \varepsilon \rangle,$$

$$f(\omega, T) = \frac{\omega^2}{8\pi^2 c^2} \langle \varepsilon \rangle.$$

Осталось определить сколько энергии в среднем приходится на одну стоячую волну.

4. Среднюю энергию стоячей волны Рэлей и Джинс вычислили из аналогии с термодинамикой – степенями свободы молекул.

Рэлей и Джинс предположили, что на каждую из двух перпендикулярных плоскостей поляризации электромагнитной волны придется по $\frac{1}{2}kT$ энергии на электрическое поле E и $\frac{1}{2}kT$ энергии на магнитное поле H . То есть по kT на каждую плоскость поляризации или всего $2kT$. Этот вывод они сделали, исходя из того, что в термодинамике при расчёте внутренней энергии молекул утверждение основного уравнения МКТ о том, что на каждую поступательную степень свободы приходится по $\frac{1}{2}kT$:

$$\langle E_{\text{кин.}} \rangle = \frac{3}{2} kT,$$

при 3-х поступательных степенях свободы, обобщается до утверждения, что в самом общем случае выражение имеет вид:

$$\langle E_{\text{кин.}} \rangle = \frac{i}{2} kT.$$

где

i – количество степеней свободы молекулы.

Причем из них три – поступательное движение, две или три – на вращательное движение молекулы (в зависимости от конфигурации молекулы, от количества осей вращения). Но, вот, на колебательное движение приходится по две степени свободы на каждое независимое колебание молекулы – одна на потенциальную и одна на кинетическую энергии.

Рэлей и Джинс предположили, что, поскольку у электромагнитного поля в наличии тоже два виде энергии, то и здесь по $\frac{1}{2}kT$ будет приходится на каждый из них.

Результирующая формула принимает вид:

$$f(\omega, T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT,$$

$$f(\omega, T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT.$$

Именно эту формулу мы привели в начале раздела.

1.7.3. Ультрафиолетовая катастрофа

На первый взгляд полученное уравнение удовлетворяет критерию закона Вина:

$$f(\omega, T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT = \frac{\omega^3}{4\pi^2 c^2} k \frac{T}{\omega},$$

$$f(\omega, T) = \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right), \quad F(\xi) = \frac{k}{4\pi^2 c^2} \cdot \frac{1}{\xi}.$$

Однако утверждение о значении длины волны максимума лучеиспускательной способности следовало из решения уравнения (*задача на поиск экстремума функции*):

$$\frac{1}{\lambda^6} \Psi(\lambda_{\max} T) = 0,$$

где

$$\Psi(\xi) = 5 \left(\xi \frac{d\phi(\xi)}{d\xi} - 5\phi(\xi) \right),$$

$$\phi(\xi) = F\left(2\pi c \cdot \frac{1}{\xi}\right) = \frac{k}{4\pi^2 c^2} \cdot \frac{1}{\left(2\pi c \cdot \frac{1}{\xi}\right)} = \frac{k\xi}{8\pi^3 c^3}.$$

И это, безусловно, верно, если данная функция вообще имеет экстремум (*данное уравнение имеет решение*). Мы не будем математически точно решать последнее уравнение. Отметим лишь, что найденная функция – формула Рэлей-Джинса экстремума не имеет, а квадратично возрастает с ростом частоты, что, в общем-то, противоречит эксперименту.

Что касается критерия – закона Стефана-Больцмана, то он, очевидно, не выполняется и вовсе. Из данного закона следует, что:

$$R^* = \int_0^{\infty} r_{\omega,T}^* d\omega = \int_0^{\infty} f(\omega, T) d\omega = \sigma T^4,$$

то есть, найденная нами функция должна иметь конечный интеграл по всей области определения по частотам, от нуля до бесконечности. Но данное условие, как мы видим, не выполняется – интеграл будет расходиться.

Можно утверждать, что формула Рэлея-Джинса будет хорошо совпадать с экспериментом в инфракрасной области спектра, не сильно различаться в видимой области и резко расходиться в области ультрафиолетовых частот излучения. *Резкое расхождение формулы Рэлея-Джинса с экспериментом и здравым смыслом в ультрафиолетовой части спектра называется ультрафиолетовой катастрофой.*



Рисунок 1.10

Соотношение лучеиспускательной способности по Вину и Рэлею-Джинсу с экспериментом

В формуле Рэлея-Джинса лучеиспускательная способность квадратично зависит от частоты. Т.о. чем выше частота, тем больше должно излучаться энергии. В результате тело должно практически мгновенно терять всю свою энергию за счет излучения высокочастотной части спектра ($U\Phi$). Даже если предположить, что, теряя бесконечно много энергии, тело также поглощает бесконечно много энергии, теория, где тела обмениваются бесконечно большими потоками энергии, становится неконструктивной.

1.8. Формула Планка

Планк предположил, что тела испускают электромагнитные волны не непрерывно, а порциями (*можно ассоциировать с углом*) и энергия одной порции пропорциональна частоте излучения. В этом случае необходимо воспользоваться распределением **Максвелла-Больцмана** по энергиям (*точнее достаточно **распределения Больцмана***): *вероятность излучения порции энергии будет пропорциональна вероятности, найти в системе элемент с энергией равной или большей энергии порции.*

1.8.1. Гипотеза Планка

Планк предположил, что излучение излучается поверхностью тел в виде порций. Причём энергия одной порции связана с частотой излучения (*гипотеза Планка*):

$$\varepsilon = h\nu, \quad (1.25)$$

либо

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad (1.26)$$

где

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad (1.27)$$

$$\omega = 2\pi\nu.$$

Здесь

ε – энергия одной порции излучения (*энергия кванта*),

$h = 6.626070040 \cdot 10^{-34}$ Дж·с,

$\hbar = 1.054571800 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка.

Распределение, вспомним, что это такое:

– насколько вероятнее встретить молекулу, частицу, объект с теми или иными свойствами.

Распределение Максвелла по скоростям:

$$f(v) = A_1 e^{-\frac{mv^2/2}{kT}}.$$

Распределение Максвелла по кинетическим энергиям:

$$f(E_k) = A_1 e^{-\frac{E_k}{kT}}.$$

Распределение Больцмана по потенциальным энергиям:

$$f(E_n) = A_2 e^{-\frac{E_n}{kT}}.$$

Нам понадобится последнее.

За один раз, при наличии у излучателя достаточной энергии может быть излучена одна или несколько порций энергии (*но, только целое число, ни полтора, ни два с половиной... ☺*):

$$\varepsilon_n = n\hbar\omega. \quad (1.28)$$

Тогда вероятность такого излучения есть отношение числа излучателей с подобной энергией к общему числу излучателей, то есть со всеми возможными энергиями (*сумма по всем возможным энергиям*):

$$P_n = \frac{N_n}{N} = \frac{A_2 e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}}{\sum_{i=1}^{\infty} A_2 e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}} = \frac{\cancel{A_2} e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}}{\cancel{A_2} \sum_{i=1}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}} = \frac{e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}}{\sum_{i=1}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}},$$

где

N_n – количество элементов с энергией E_n ,

N – общее количество элементов (суммируем по всем возможным n)
 $n \in [0; \infty)$.

Тогда средняя энергия будет равна:

$$\langle \varepsilon \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} P_n \varepsilon_n. \quad (1.29)$$

Как рассчитывать среднее значение мы уже разбирали в ходе рассмотрения теории макросистем (введение понятия функции распределения):

Мы знаем, что среднее арифметическое есть наиболее вероятное значение величины, каждое значение которой выпадает с равной вероятностью:

$$\langle a \rangle = \frac{a_1 + a_2 + \dots + a_N}{N} = \frac{1}{N} a_1 + \frac{1}{N} a_2 + \dots + \frac{1}{N} a_N = \sum_{i=1}^N \frac{1}{N} a_i$$

Если некоторые значения могут встречаться чаще чем другие, получаем:

$$\langle a \rangle = \frac{N_1 a_1 + N_2 a_2 + \dots + N_N a_N}{N} = \frac{N_1}{N} a_1 + \frac{N_2}{N} a_2 + \dots + \frac{N_N}{N} a_N = \sum p_i a_i,$$

где

$p_i = \frac{N_i}{N}$ – вероятность выпадения i -ого значения,

N_i – число событий, в которых выпадает i -ое значение,

N – общее число событий.

Подставим в выражение значения вероятностей, рассчитанных из распределения Больцмана и значение порции энергии из условия излучения сразу n квантов:

$$\langle \varepsilon \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} P_n \varepsilon_n = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\underbrace{\frac{e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}}{\sum_{i=1}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}}}_{P_n} \cdot \underbrace{n\hbar\omega}_{\varepsilon_n} \right) =$$

$$= \hbar\omega \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{ne^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}}}{\sum_{i=1}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}} \right) = \hbar\omega \frac{\sum_{n=1}^{\infty} ne^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}} .$$

\Rightarrow необходимый минимум...

Дальше идут чисто математические преобразования... Введем промежуточное обозначение. Обозначим:

$$x = \frac{\hbar\omega}{kT} ,$$

тогда

$$\langle \varepsilon \rangle = \hbar\omega \frac{\sum_{n=1}^{\infty} ne^{-nx}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}} .$$

Здесь x – непрерывно изменяющийся действительный аргумент. Рассмотрим отдельные отношения сумм. Можно заменить это отношение на производную некоторой функции по x :

$$\frac{\sum_{n=1}^{\infty} ne^{-nx}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}} = -\frac{d}{dx} \ln \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx} .$$

Действительно:

$$\frac{d}{dx} \ln \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx} = \underbrace{\frac{1}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}}}_{\frac{d \ln \dots}{dx}} \cdot \frac{d \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}}{dx} = \frac{1}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}} \sum_{n=1}^{\infty} -ne^{-nx} = -\frac{\sum_{n=1}^{\infty} ne^{-nx}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}} .$$

А теперь заметим, что выражение

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}$$

– есть сумма геометрической прогрессии.

Геометрическая прогрессия:

$$b_{n+1} = q \cdot b_n, b_1 \neq 0, q \neq 0 .$$

Тогда сумма её n первых членов равна:

$$S_n = \sum_{i=1}^n q_i = \frac{b_1(1-q_n)}{1-q}.$$

И в случае убывающей бесконечной геометрической прогрессии:

$$|q| < 1 \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} S_n = S_\infty = \sum_{i=1}^{\infty} q_i = \frac{b_1}{1-q}.$$

В нашем случае

$$b_1 = 1, q = e^{-x}.$$

Тогда

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx} = \frac{1}{1-e^{-x}},$$

– сумма бесконечной убывающей геометрической прогрессии.

Иначе:

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx} = \frac{1-e^{-\infty x}}{1-e^{-x}} = \frac{1}{1-e^{-x}},$$
$$e^{-\infty x} = \frac{1}{e^{\infty x}} = 0.$$

А теперь подставим сумму в исходное выражение в дифференциалах:

$$-\frac{d}{dx} \ln \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx} = -\frac{d}{dx} \ln \frac{1}{1-e^{-x}} = -\frac{d}{dx} \ln(1-e^{-x}) =$$
$$= \frac{d}{dx} \ln(1-e^{-x}) = \frac{e^{-x}}{1-e^{-x}}.$$

Подставив выражение для сумм в исходную формулу, получим:

$$\langle \varepsilon \rangle = \hbar \omega \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n e^{-nx}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}} = \hbar \omega \frac{e^{-x}}{1-e^{-x}},$$

и немного преобразуем выражение, поделив числитель и знаменатель на e^{-x} :

$$\langle \varepsilon \rangle = \hbar\omega \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \hbar\omega \frac{\frac{e^{-x}}{e^{-x}}}{\frac{1}{e^{-x}} - \frac{e^{-x}}{e^{-x}}} = \hbar\omega \frac{1}{e^x - 1}.$$

Теперь подставим вместо x его исходное значение:

$$x = \frac{\hbar\omega}{kT} \Rightarrow \langle \varepsilon \rangle = \hbar\omega \frac{1}{e^x - 1} = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1},$$

и подставим полученное значение средней энергии в исходное выражение соотношения средней энергии одной стоячей волны и искомой функции Кирхгофа, куда Рэлей и Джинс подставили значение $2kT$:

$$r_{\omega,T}^* = f(\omega, T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} \langle \varepsilon \rangle \Rightarrow$$

$$r_{\omega,T}^* = f(\omega, T) = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}.$$

В итоге имеем **формулу Планка** лучеиспускательной способности АЧТ, **планковский спектр** излучения АЧТ:

$$r_{\omega,T}^* = f(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (1.30)$$

1.8.2. Распределение Планка (планковский спектр)

На формулу Планка можно смотреть, как на универсальную функцию частоты и температуры Кирхгофа, как на энергетическую светимость АЧТ, как на спектр излучения АЧТ и как на распределение по энергиям фотонов в излучении АЧТ.

И так, формула **Планка имеет вид**:

$$r_{\omega,T}^* = f(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}.$$

Для сравнения приведём другие её выражения:

$$r_{\omega,T}^* = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda^3} \frac{1}{e^{\frac{2\pi\hbar}{kT\lambda}} - 1}, \quad (1.31)$$

$$r_{\lambda,T}^* = \frac{\hbar\omega^5}{8\pi^3 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}, \quad (1.32)$$

$$r_{\lambda,T}^* = \frac{4\pi^2\hbar c^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{2\pi\hbar}{kT\lambda}} - 1}. \quad (1.33)$$

Замечание 1: формула Планка удовлетворяет закону Вина:

$$f(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} = \omega^3 \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} = \omega^3 \cdot F\left(\frac{\omega}{T}\right),$$

$$F(\xi) = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\xi}{k}} - 1}.$$

Причём эта функция уже будет иметь необходимый нам экстремум (экспонента в отрицательной степени или в положительной, но в знаменателе – очень быстро убывающая функция)

Замечание 2. Формула Планка удовлетворяет закону Стефана-Больцмана – её интеграл по всей области определения конечен и мы даже можем рассчитать теоретическое значение постоянной Стефана-Больцмана:

$$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60c^2 \hbar^3} \quad (1.34)$$

Немного подробнее, проинтегрируем формулу Планка по всему частотному диапазону. По ходу вычислений мы используем подстановку $\omega = \frac{kT}{\hbar} x$. Так же мы не будем сами вычислять значение определённого интеграла, а просто приведём его значение:

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

И так, вычислим значение нашего интеграла:

$$R^* = \int_0^{\infty} f(\omega, T) d\omega = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \int_0^{\infty} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega = \left| \begin{array}{l} \omega = \frac{kT}{\hbar} x \\ d\omega = \frac{kT}{\hbar} dx \end{array} \right| =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \int_0^\infty \frac{\left(\frac{kT}{\hbar}\right)^3 x^3}{e^{\frac{\hbar \cdot kT}{kT \cdot \hbar} x} - 1} \frac{kT}{\hbar} dx = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \underbrace{\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx}_{\frac{\pi^4}{15}} = \\
&= \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \cdot \frac{\pi^4}{15} = \frac{\hbar \pi^4 k^4}{4 \cdot 15 \cdot c^2 \hbar^4} T^4 = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3} T^4
\end{aligned}$$

Замечание 3. Формула Рэлея-Джинса является приближенным значением формулы Планка при $\omega \rightarrow 0$, точнее первыми членами её разложения в ряд Тейлора в районе нуля (ряд Маклорена).

Это можно несложно вычислить:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0) (x - x_0)^n \text{ — ряд Тейлора,}$$

$$x_0 = 0 \Rightarrow f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) (x)^n \text{ — ряд Маклорена.}$$

Причём ряд Маклорена для экспоненты будет выглядеть так:

$$e^{\alpha x} = \underbrace{1 + \alpha x}_{\approx e^{\alpha x}, x \ll 1} + \frac{\alpha^2 x^2}{2!} + \frac{\alpha^3 x^3}{3!} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n x^n}{n!}.$$

Это следует из следующего вида производных:

$$\left(\alpha^n e^{\alpha x}\right)' = \alpha^{n+1} e^{\alpha x}, \quad \left(e^{\alpha x}\right)^{(n)}(0) = \alpha^n \underbrace{e^{\alpha 0}}_1 = \alpha^n.$$

Тогда для экспоненты, стоящей в знаменателе нашей функции, получим:

$$\begin{aligned}
\alpha x &\equiv \frac{\hbar}{kT} \omega, \quad x \ll 1 \Rightarrow e^{\frac{\hbar}{kT} \omega} \approx 1 + \frac{\hbar}{kT} \omega, \\
r_{\omega, T}^* &= \frac{\hbar \omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} \approx \frac{\hbar \omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{\lambda + \frac{\hbar}{kT} \omega - \lambda} = \\
&= \frac{\hbar \omega^3}{4\pi^2 c^2} \cdot \frac{kT}{\hbar \omega} = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT.
\end{aligned}$$

Последнее выражение точно повторяет формулу Рэлея-Джинса.

Замечание 4. Планк воспринимал гипотезу, выдвинутую в ходе вывода формулы – то, что электромагнитное излучение испускается поверхностью порциями – как свойство излучателей самой поверхности. И, в данном случае, это вполне можно было воспринять именно так (например: *модель атома водорода Бора* – «ну, вот так они умеют плеваться порциями энергии...»). Именно это и сделал Эйнштейн, дав в 1916 году новый вывод формулы Планка, основанный на механизме излучения и поглощения света,

вытекающем из *постулатов Бора* (Модель атома водорода Бора, как и постулаты Бора, будут рассмотрены далее, в следующем разделе курса). Причём здесь Эйнштейном была рассмотрена возможность атомом, как излучать, так и поглощать электромагнитную волну только в виде определённой порции, кванта в соответствии с соотношением Планка:

$$E = \hbar\omega.$$

Всё это ещё не требовало, чтобы данное свойство (*наличие порции энергии*) было свойством самой электромагнитной волны, а не свойством источников/приёмников энергии. Понятие кванта света – фотона было сформировано Эйнштейном на базе анализа своего уравнения фотоэффекта и ещё ряда необъяснимых другим способом явлений.

Отдельно обратим внимание на некоторую неразбериху с датами: 1900г. – формула Рэлея и 1905г. – Джинс, та же формула, но более точно. И, с другой стороны, уже в 1900г. – гипотеза Планка. 1905г. – Эйнштейн получает уравнение фотоэффекта (*основной толчок для предположения существования фотона*), 1909г. – он же, импульс фотона и 1916 – новое доказательство формулы Планка, в принципе, не опирающееся на идею существования фотона. Просто революционные научные идеи обычно долго завоёвывают своё право на существование. Мир ещё длительное время пытается объяснить полученные факты «старыми методами». Отметим ещё раз, что к данному моменту Эйнштейн уже написал свою знаменитую формулу для импульса фотона. Просто этот вывод не требует гипотезу существования фотона как таковой. Нобелевскую премию за фотоэффект он получил лишь в 1921 году.

2. Квантовая оптика

2.1. Фотоэффект

Схема опыта:

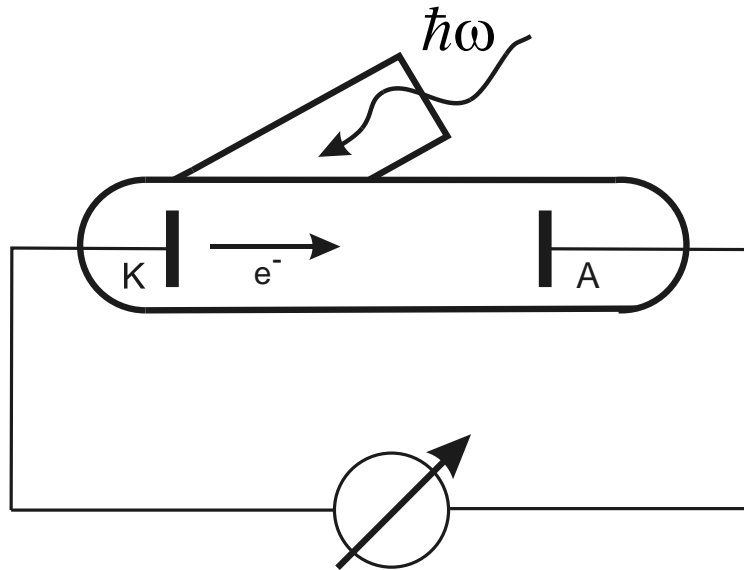


Рисунок 2.1

Фотоэффект – простейший эксперимент по наблюдению

На катод из легкоионизируемого металла падает свет. Свет вырывает из катода электрон. Катод из легко ионизированного металла. Электрон летит к аноду. В цепи начинает течь ток.

Можно усложнить схему опыта и снять вольтамперную характеристику для фотоэффекта.

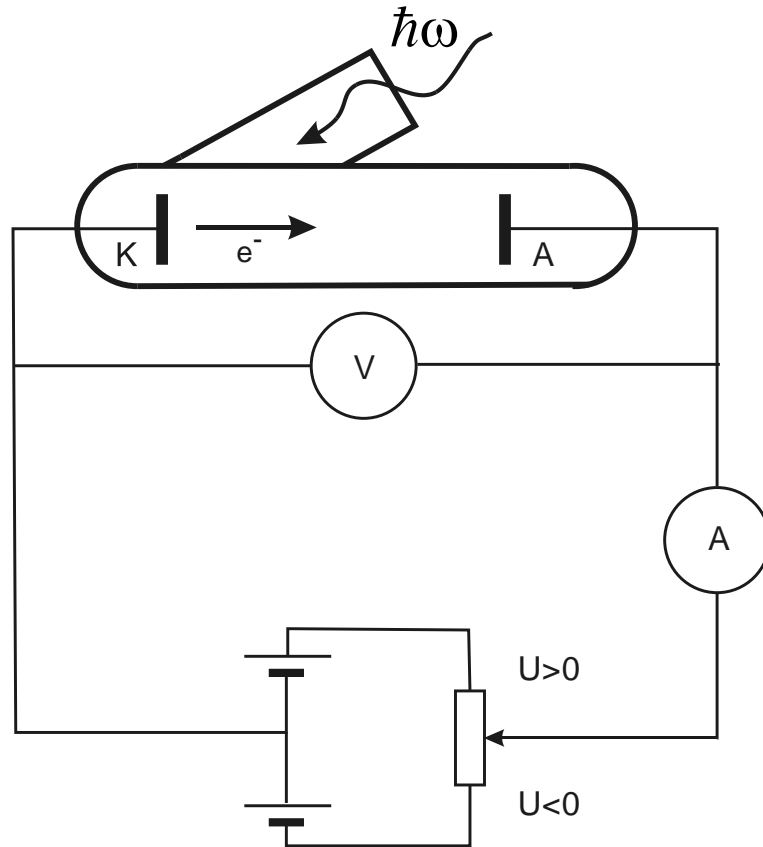


Рисунок 2.2

Фотоэффект – ток насыщения и задерживающее напряжение

Если к катоду и аноду приложить разность потенциалов той или иной полярности, то мы можем либо ускорять либо тормозить электрон при его движении. Зависимость фототока (*тока в цепи фотоэлемента*) называется вольтамперной характеристикой.

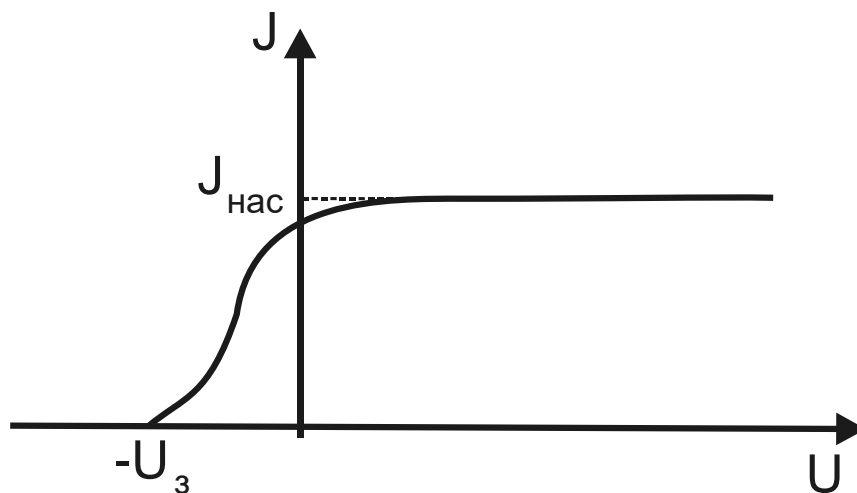


Рисунок 2.3

Вольтамперная характеристика для фотоэффекта

Ток насыщения.

Если подать на катод «-», а на анод «+», поле будет ускорять выбитые за счёт фотоэффекта электроны. Сначала ток будет расти, но затем рост тока прекратится. Это значение силы тока называется *током насыщения*. Данный эффект связан с тем, что все выбитые из катода электроны за максимально короткое время достигают анода и больше электронов просто нет. Таким образом, сила тока определяется количеством электронов выбитых в единицу времени из катода (*сила тока – заряд, протекающий через сечение проводника за единицу времени*). Увеличение интенсивности света приводит к увеличению тока насыщения. *Этот факт вполне укладывается в классическую теорию – больше сила света – больше электронов в единицу времени выбивается из катода.*

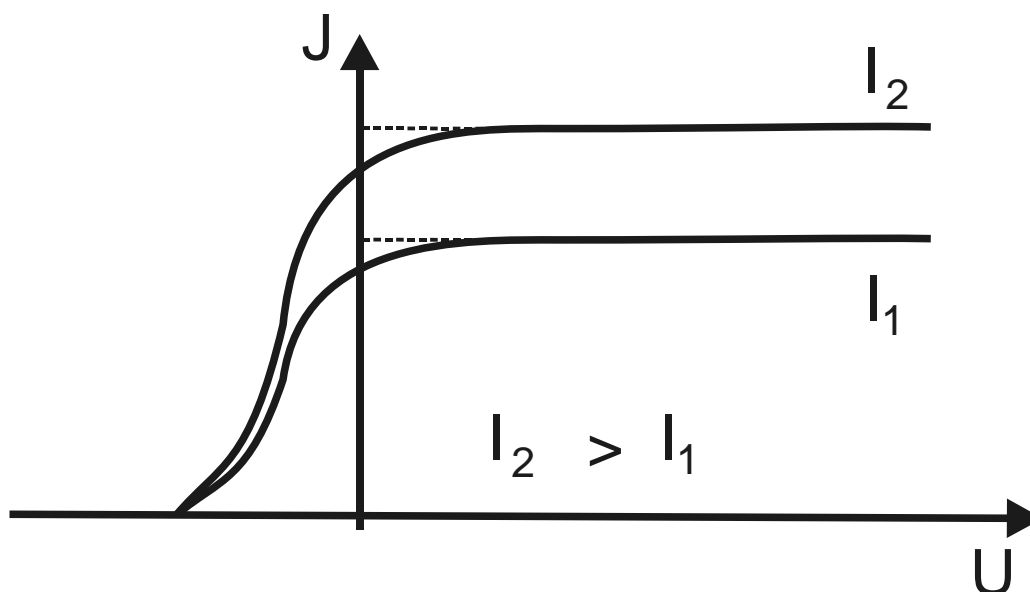


Рисунок 2.4

Зависимость тока насыщения от интенсивности падающего света

Задерживающее напряжение, энергия электрона.

Подадим на катод «+», а на анод «-». Вылетающие с катода электроны будут тормозиться внешним приложенным полем и ток в цепи начнёт уменьшаться. Если работа электростатического поля больше или равна кинетической энергии фотоэлектрона, электроны возвратятся к катоду за счет электростатической силы. **Фотоэффект прекращается.** Это напряжение называется **задерживающим напряжением**.

Зная задерживающее напряжение, можно определить кинетическую энергию фотоэлектронов (*точнее максимально возможное её значение*). По закону сохранения энергии:

$$A_{\text{электростат.}} = eU_3 = E_{\text{кин.}}, \quad (2.1)$$

$$eU_3 = \frac{m_e v_e^2}{2}, \quad (2.2)$$

где

U_3 – задерживающее напряжение.

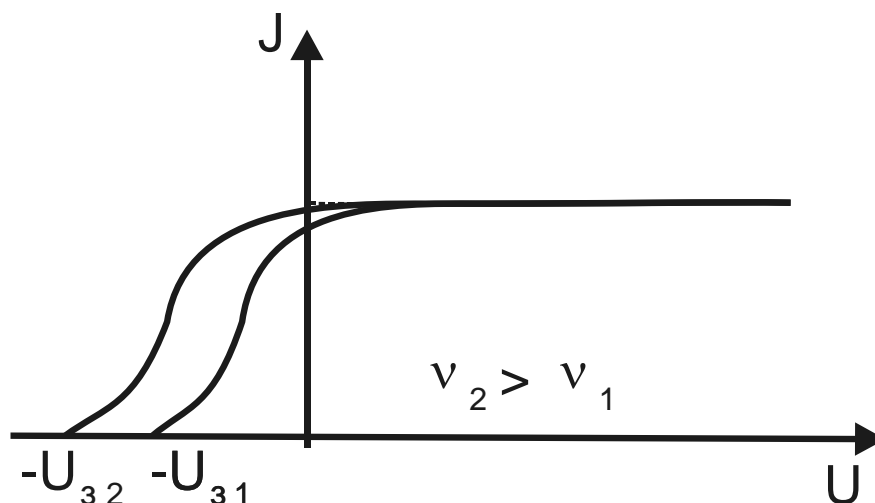


Рисунок 2.5

Зависимость задерживающего напряжения от частоты падающего света

Частота красной границы.

Для фотоэффекта было обнаружено следующее явление – явление, получившее название *красной границы фотоэффекта*. При уменьшении частоты менее этого значения (*в красную область*) либо увеличении длины волны фотоэффект прекращался. Причём, возобновить его не удавалось ни каким повышением интенсивности света.

Противоречия с классической физикой (факты, необъяснимые вне рамок квантовой оптики):

1. Кинетическая энергия фотоэлектрона зависит только от частоты: кинетическую энергию определяем по задерживающей энергии, исходя из классических представлений, энергия должна зависеть от частоты и амплитуды колебаний, т.е. от частоты и интенсивности света.

2. Наличие частоты красной границы, т.е. частоты излучения с частотой, ниже которой не возникает фотоэффект, ни при каком увеличении интенсивности светового потока. С классической точки зрения, как и в предыдущем пункте, увеличение интенсивности должно было бы привести к увеличению энергии волны и вызвать-таки фотоэффект.

Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта.

Рассмотрим металл катода в момент возникновения фотоэффекта. Электроны в металле, в первом приближении, могут быть представлены, как электронный газ – свободно движущиеся частицы (электроны проводимости) между жёстко закреплёнными в узлах кристаллической решётки ионами атомов.

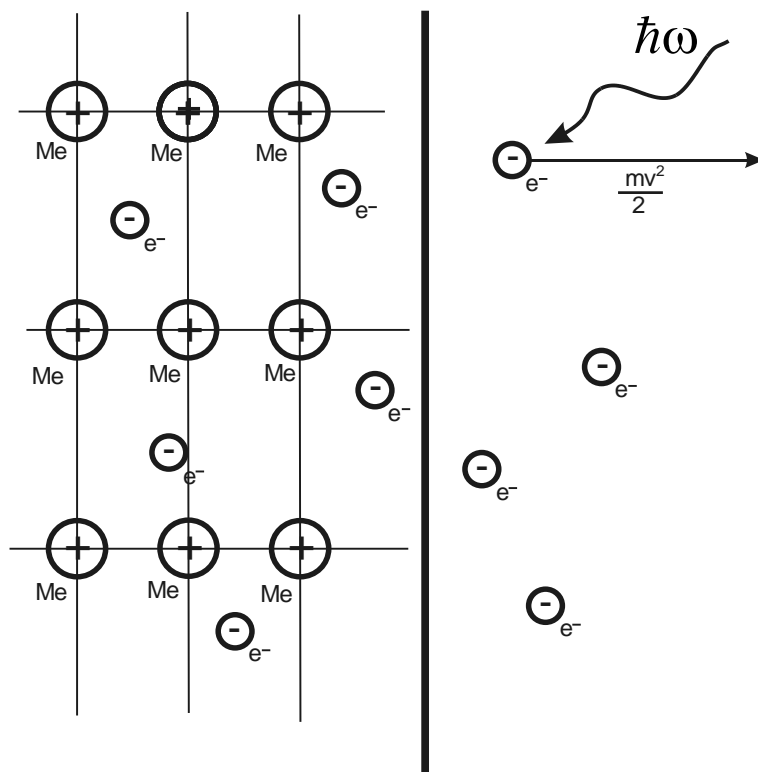


Рисунок 2.6

Состояние электронов в металле в момент возникновения фотоэффекта

Уравнение представляет собой запись (*проявление*) закона сохранения энергии для взаимодействия фотона (*кванта, порции электромагнитной волны*) и находящегося у поверхности металла электрона. Электрон (*наиболее «горячий»*) покидает металл за счёт своей кинетической энергии, но удерживается у поверхности за счёт нескомпенсированного положительного заряда ядер кристаллической решетки (*положительно заряженных ионов металла*). При взаимодействии часть энергии фотона идёт на работу выхода – работу против электростатического поля затрачиваемую на отрыв электрона от металла. Оставшаяся энергия становится кинетической энергией электрона. Правда эта энергия может быть и меньше, т.к., часть её может потеряться в результате соударения с другими электронами и т.д. В итоге имеем:

$$h\nu = A_{\text{вых}} + \left(\frac{m_e v^2}{2} \right)_{\text{max}}, \quad (2.3)$$

либо, в записи через циклическую частоту:

$$\hbar\omega = A_{\text{вых}} + \left(\frac{m_e v^2}{2} \right)_{\text{max}} . \quad (2.4)$$

Работа выхода есть работа против электростатического поля и равна произведению заряда частицы ($-e$) на разность потенциалов. При этом потенциал поверхности равен $\varphi_{\text{пов.}}$, а потенциал вакуума, куда летит электрон равен нулю:

$$A_{\text{вых}} = q\Delta\varphi = (-e)\Delta\varphi = -e(0 - \varphi_{\text{пов.}}) = e\varphi_{\text{пов.}} , \quad (2.5)$$

$$h\nu = e\varphi_{\text{пов.}} + \left(\frac{m_e v^2}{2} \right)_{\text{max}} . \quad (2.6)$$

Тогда уравнение фотоэффекта можно записать в следующих двух видах:

$$h\nu = A_{\text{вых}} + eU_3 , \quad (2.7)$$

либо (подставив выражение $A_{\text{вых}} = e\varphi_{\text{пов.}}$)

$$h\nu = e\varphi_{\text{пов.}} + eU_3 . \quad (2.8)$$

Немного преобразовав уравнение можем прийти к следующему виду – линейной зависимости задерживающего напряжения от частоты падающего света:

$$\frac{h}{e}\nu = \varphi_{\text{пов.}} + U_3$$

$$U_3 = \frac{h}{e}\nu - \varphi_{\text{пов.}} \quad \left[y = ax + b, a = \frac{h}{e}, b = -\varphi_{\text{пов.}} \right]$$

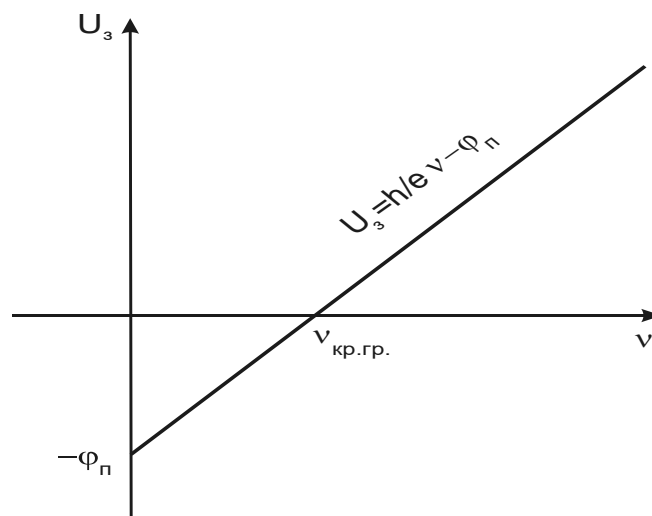


Рисунок 2.7

График зависимости задерживающего напряжения от частоты

Для частоты красной границы имеем: при этой частоте энергии фотона не хватает даже на отрыв электрона от поверхности металла. Следовательно, в уравнении фотоэффекта кинетическую энергию фотоэлектрона можно положить нулю:

$$\nu = \nu_{кр.гр.} \Rightarrow \left(\frac{m_e v^2}{2} \right)_{\max} = 0$$

Имеем:

$$h\nu_{кр.гр.} = A_{вых} \Rightarrow \nu_{кр.гр.} = \frac{A_{вых}}{h}$$

Задерживающее напряжение при частоте красной границы, очевидно, равно нулю. Определим наши константы из графика зависимости задерживающего напряжения от частоты падающего света:

$$\nu = \nu_{кр.гр.} \Rightarrow U_z = 0 \Rightarrow \frac{h}{e} \nu - \varphi_{нов.} = 0$$

$$\nu = 0 \Rightarrow U_z = \frac{h}{e} \cdot 0 - \varphi_{нов.} = -\varphi_{нов.}$$

$$\nu = 0 \Rightarrow U_z = -\varphi_{нов.}$$

Идея рождения квантовой механики: если гипотеза Планка утверждала, что излучение электромагнитной волны происходит порциями, то объяснение этого факта могло быть сведено к свойствам самих излучателей (*например: модель атома водорода Бора, мы уже рассматривали этот вариант рассуждений*). Из уравнения Эйнштейна для фотоэффекта следует, что взаимодействие даже со свободными электронами также носит порционный квантовый характер. Из этого утверждения может быть сделан один вывод: на любом этапе своего существования электромагнитная волна может быть представлена как совокупность порций энергии (*квантов*). С классической точки зрения понятие порции энергии обычно приписывается частицам или компактным телам (*кинетическая, потенциальная энергия тела, частицы и, конечно же импульс*). Для волны характерно понятие плотности потока (*плотность потока энергии, импульса*). Чем больший «кусочек» волны мы возьмем в рассмотрение, тем больше энергии и импульса придется на этот «кусочек». Т.о. сопоставление волне ее деление на порции энергии требует однозначного сопоставления волне потока частиц (с энергией равной энергии этой порции).

Утверждение Эйнштейна (ещё раз). Световая волна не просто излучается или поглощается в виде порций (как считал) Планк, сама состоит из неделимых элементов. С движением электромагнитной волны может быть сопоставлен поток частиц.

(Вернуться к ссылке из раздела [«Распределение Планка»](#))

Замечание. В литературе встречается утверждение, что только опыт Боте (будет рассмотрен ниже) является полным и прямым доказательством существования фотонов. Весьма спорный факт. Опыт Боте, действительно, является прямым доказательством существования фотонов, и об этом мы ещё поговорим. Однако, если гипотеза Планка была выдвинута её автором с тем соображением, что данное свойство (излучение электромагнитной волны порциями) является свойством излучателей, то фотоэффект не может быть объяснён исходя чисто из свойства поглотителей. В данном случае речь идёт о взаимодействии свободной частицы с электромагнитной волной. Если, скажем, в модели рассматривалось бы взаимодействие волны, к примеру, с атомом, хотя бы в модели Бора, этот факт мог бы быть списан на свойства поглощения самого атома. В данном же случае, речь идёт о взаимодействии двух частиц. Что же касается того факта, что квантовая природа проявляется лишь при взаимодействии (излучении и поглощении), то мы и дальше будем оставаться на этих позициях – см. эпиграф к разделу «Квантовая механика». Просто, в отличие от опыта Боте, в данном случае подобные фундаментальные выводы требуют гораздо большего осмысления и проникновения в суть вещей.

Важно!!! Однако ни в коем случае не следует ассоциировать данное свойство со свойством компактности частицы. Данное утверждение справедливо как для фотона, так и для электрона.

Тарелка манной каши. Представьте себе, что в столовой Вы взяли на завтрак тарелку манной каши. Ваша порция манной каши – порция, одна порция... Но, по правилам этой столовой Вы должны съесть или убрать за собой всю порцию без остатка. А дальше, вот незадача, Вас толкнули, и Вы накапали своей кашей на пол. День не задался с самого начала, и Вы, неаккуратно поставив тарелку на стол, ещё пролили и туда тоже. А теперь спросим – где локализована Ваша порция каши? В тарелке? Нет, на столе, на полу, и далее, и далее. И если Вам надо убрать её за собой целиком – Вам надо убрать всю порцию. И со стола, и с пола, а если понадобится, и со всего Московского проспекта! Никто не говорит о месте локализации данной порции энергии, речь всего лишь идёт о том, что утилизироваться эта порция может лишь как одно целое и неделимое. Правда, потом мы узнаем, что, при необходимости, можно и выплюнуть что-то лишнее... ☺ Что касается локализации – это может быть как вся Вселенная, так и ограниченная область пространства, а в определённых случаях, в принципе и геометрическая точка. Но последний вариант наиболее экзотическое явление. Заметим лишь, что в задачах макро-физики область пространства, где частица находится с, практически, 100% вероятностью столь мала, что вполне подпадает под определение материальной точки – области пространства, размерами которой можно пренебречь.

2.2. Корпускулярная теория света

2.2.1. Импульс фотона

И так, с электромагнитной волной мы можем связать поток частиц – фотонов. Определим параметры (*движения*) каждой из этих частиц. Если для волны основными параметрами являются *частота* и *волновой вектор*, то для частицы это *энергия* и *импульс*.

«*Неправильный вывод*». Надо понимать, что утверждение взято в кавычки. Поведённый ниже вывод является математически абсолютно верным и логически законченным с физической точки зрения. Однако, он не акцентирует внимание на тех истинных предположениях, которые были сделаны Эйнштейном и истинной логике его рассуждений. Однако (*следует помнить*), именно этот вывод в первую очередь требуется при ответе на данный вопрос.

В основе рассуждений лежит *гипотеза Планка*:

$$E = h\nu$$

или

$$E = \hbar\omega,$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi},$$

$$\omega = 2\pi\nu$$

где

Утверждение: для фотона (для релятивистской частицы)

$$E = pc. \quad (2.9)$$

Замечание: пусть $E = E_{\text{кин}}$

$$E_{\text{кин}} = \frac{mv^2}{2}$$

$$mv = p$$

$$E_{\text{кин}} = \frac{pv}{2}$$

Вообще говоря, в Специальной Теории Относительности (СТО) коэффициент $\frac{1}{2}$ будет меняться в зависимости от величины скорости (*в данном случае мы рассматривали не релятивистский вариант*). Можно показать по СТО, если $v = c \Rightarrow E = pv$, т.е.:

$$E = pc$$

С другой стороны:

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

$$\lambda = cT = \frac{c}{\nu} = \frac{2\pi c}{\omega}.$$

Отсюда имеем:

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}.$$

Подставим то и другое в соотношение Планка для энергии и частоты:

$$\begin{aligned} pc &= \hbar \frac{2\pi c}{\lambda} \\ p &= \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Учитывая, что

$\frac{2\pi}{\lambda} = k$ – волновое число, получаем:

$$p = \hbar k.$$

При этом

$$\bar{k} = k\bar{n}, \quad \bar{n} \uparrow\uparrow \bar{p}.$$

Окончательно имеем:

$$\bar{p} = \hbar\bar{k} \quad (2.11)$$

Из (2.10) следует:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad (2.12)$$

или

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} \quad (2.13)$$

Причём здесь, то есть для фотона, $v = c$.

Замечание 1: Выражением для импульса фотона является формула (2.11).

Замечание 2: Соотношение (2.12) или (2.13) является соотношением, взятым де Бройлем в качестве длины волны частицы (*длина волны де Бройля*).

Замечание 3: «Правильный вывод» (истинное положение вещей).

В четырехмерном пространстве-времени СТО (*пространстве Минковского*) E и \bar{p} составляют четырехмерный вектор (*4-вектор*):

$$\begin{aligned} \mathbb{R}^3 : \bar{p} &= (p_x, p_y, p_z) \\ M \equiv \mathbb{R}^4 : (E, \bar{p}) &= (E, p_x, p_y, p_z) \end{aligned}$$

Кроме того, 4-хвектором являются также циклическая частота и три компоненты (*проекции*) волнового вектора:

$$(\omega, \bar{k}) = (\omega, k_x, k_y, k_z)$$

Утверждение Эйнштейна: если пропорциональны нулевые компоненты (нулевые координаты, проекции) четырех векторов, то должны быть пропорциональны и сами вектора.

$$\begin{cases} E = \hbar\omega \\ \bar{p} = \hbar\bar{k} \end{cases} \quad (2.14)$$

или

$$(E, p_x, p_y, p_z) = \hbar(\omega, k_x, k_y, k_z) \quad (2.15)$$

Уравнение волны: если принять утверждение (2.14) или (2.15), то волновой вектор и частоту можно выразить через энергию и импульс:

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad (2.16)$$

$$\bar{k} = \frac{\bar{p}}{\hbar} \quad (2.17)$$

Вспомним возможные математические (*уравнения*) представления для колебаний и волн (*повторение*):

$x = A \cos(\omega t + \varphi_0)$ – классическая форма представления колебаний,

$x = A e^{i(\omega t + \varphi_0)}$ – представление колебаний в комплексной (экспоненциальной) форме,

либо

$x = \hat{A} e^{i(\omega t)}$, $\hat{A} = A e^{i\varphi_0}$ – колебания в комплексной (экспоненциальной) форме с комплексной амплитудой.

Напомним:

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$$

– формула Эйлера.

$$|e^{i\varphi}| = 1$$

$$z = A e^{i\varphi} = A \cos \varphi + A i \sin \varphi.$$

$$\begin{aligned} \varphi = \omega t + \varphi_0 \Rightarrow z = A e^{i(\omega t + \varphi_0)} &= A (\cos(\omega t + \varphi_0) + i \sin(\omega t + \varphi_0)) = \\ &= A \cos(\omega t + \varphi_0) + A i \sin(\omega t + \varphi_0). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x = \operatorname{Re}|z| \Rightarrow x = \operatorname{Re}(A e^{i(\omega t + \varphi_0)}) &= \operatorname{Re}(A \cos(\omega t + \varphi_0) + A i \sin(\omega t + \varphi_0)) = \\ &= A \cos(\omega t + \varphi_0). \end{aligned}$$

Опуская значок взятия действительной части, получаем:

$$x = A e^{i(\omega t + \varphi_0)}.$$

Либо, вводя понятие комплексной амплитуды:

$$x = Ae^{i(\omega t + \varphi_0)} = Ae^{i(\omega t) + i(\varphi_0)} = Ae^{i(\omega t)} e^{i(\varphi_0)} = Ae^{i\varphi_0} e^{i\omega t} = \hat{A} e^{i\omega t}.$$

Здесь:

$$\hat{A} = Ae^{i\varphi_0} \quad \text{— комплексная амплитуда.}$$

Аналогично для уравнения волны имеем:

$$\xi = A \cos(\omega t - kx + \varphi_0) \quad \text{— классическая волна,}$$

$$E = E_0 \cos(\omega t - kx + \varphi_0) \quad \text{— электромагнитная (классическая) волна,}$$

$$E = E_0 e^{i(\omega t - kx + \varphi_0)} \quad \text{— электромагнитная волна в комплексной форме,}$$

$$\xi = Ae^{i(\omega t - kx + \varphi_0)} \quad \text{— произвольная волна в комплексной форме,}$$

$$\xi = \hat{A} e^{i(\omega t - kx)}, \quad (2.18)$$

где $\hat{A} = Ae^{i\varphi_0}$ — комплексная амплитуда
— произвольная волна в комплексной форме с комплексной амплитудой.

$$\vec{E} = \hat{E}_0 e^{i(\omega t - kx)}, \quad \hat{E}_0 = \vec{E}_0 e^{i\varphi_0} \quad (2.19)$$

— электромагнитная волна в комплексной форме с комплексной амплитудой.

Используем уравнение для волны в виде выражения (2.18), подставив туда вместо циклической частоты и волнового числа их выражения из соотношений (5) и (6).

$$\xi = \hat{A} e^{i\left(\frac{E}{\hbar}t - \frac{p}{\hbar}x\right)}$$

В квантовой механике обычно используется следующая форма представления:

$$\xi = \hat{A} e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)}$$

Она отличается от предыдущей знаком «-» перед мнимой единицей (в скобках слагаемые переставлены местами). По существу, это не имеет ни какого значения, поскольку выражения отличаются направлением вращения вектора в комплексной плоскости (*по* и *против часовой стрелки*). Но это направление вращения нам не известно и никогда не может быть определено в эксперименте (*проекция на действительную ось остаётся той же самой*).

$$\text{Для фотона:} \quad \xi = \vec{E} \quad (\text{напряженность электрического поля}).$$

$$\text{Для электрона:} \quad \xi = \psi \quad (\text{волновая функция}).$$

Замечание: до сих пор комплексная форма записи волны была лишь удобной формой представления. В квантовой механике считается, что мир сугубо комплексен.

В итоге, выражения для волны, описывающей движение кванта света или кванта вещества будут иметь следующий вид (для исключения путаницы энергия в первом выражении обозначена, как W):

$$E = \hat{E}_0 e^{i\left(\frac{E}{\hbar}t - \frac{p}{\hbar}x\right)}, \quad (2.20)$$

$$\Psi = \hat{\Psi}_0 e^{i\left(\frac{E}{\hbar}t - \frac{p}{\hbar}x\right)}. \quad (2.21)$$

2.2.2. Давление света

Отдельно стоит рассмотреть такое явление, как «давление света». В принципе, оно было предсказано ещё Кеплером в VII веке, и объясняло поведение хвостов комет при пролёте коло Солнца. Первое объяснено в рамках классического электромагнетизма световому давлению дал Максвелл в 1873 году. Но экспериментально давление света было открыто Лебедевым в 1899 году.

Давление света может быть легко объяснено с использованием гипотезы существования фотонов – *фотон просто передаёт свой импульс поверхности, не которую падает свет*. Хотя, помимо квантового, имеется и классическое объяснение данного явления.

Итак. Объясним явление давления света с квантовой точки зрения. По определению давление есть сила, делённая на площадь:

$$P = \frac{F}{S}.$$

Запишем II закон Ньютона в формулировке – импульс силы равен изменению импульса тела:

$$F \cdot \Delta t = \Delta p \Rightarrow F = \frac{\Delta p}{\Delta t},$$

и подставим полученное выражение для силы в определение давления:

$$P = \frac{F}{S} = \frac{\Delta p}{S \Delta t}.$$

В свою очередь изменение импульса потока фотонов будет равно числу фотонов, умноженному на изменение импульса одного фотона:

$$\Delta p = N_{\phi} \Delta p_{1-\text{ого } \phi}.$$

А оно в свою очередь будет равно импульсу фотона в случаи его поглощения:

$$\Delta p_{1-\text{ого } \phi} = p_{\phi},$$

или удвоенному импульсу фотона в случаи его отражения:

$$\Delta p_{1-\text{ого } \phi} = 2p_{\phi}.$$

В итоге суммарное изменение импульса будет следующим образом выражаться через общее число фотонов, коэффициент отражения ρ и импульс одного фотона:

$$\begin{aligned}\Delta p &= \underbrace{N_\phi \cdot (1 - \rho) \cdot p_\phi}_{\text{поглощённые}} + \underbrace{N_\phi \cdot \rho \cdot 2p_\phi}_{\text{отражённые}} = \\ &= N_\phi p_\phi - \cancel{N_\phi \rho p_\phi} + \cancel{2} N_\phi \rho p_\phi, \\ \Delta p &= N_\phi (1 + \rho) p_\phi.\end{aligned}$$

Используем уже рассмотренную нами связь энергии и импульса фотона, как релятивистской частицы. Выразим из неё импульс фотона через его энергию:

$$E_\phi = p_\phi c \Rightarrow p_\phi = \frac{1}{c} E_\phi$$

Тогда суммарное изменение импульса в потоке фотонов будет равно:

$$\Delta p = N_\phi (1 + \rho) \cdot \frac{1}{c} E_\phi = \underbrace{N_\phi \cdot E_\phi}_E (1 + \rho) \cdot \frac{1}{c} = \frac{E}{c} (1 + \rho).$$

Подставим полученное выражение в формулу для давления:

$$P = \frac{\Delta p}{S \Delta t} = \frac{1}{c} \underbrace{\frac{E}{S \Delta t}}_{E_e} (1 + \rho).$$

Здесь E_e – плотность потока энергии в световой волне, падающей на поверхность:

$$E_e = \frac{E_\phi}{S \Delta t}. \quad (2.22)$$

Окончательно имеем формулу для расчёта давления света:

$$P = \frac{E_e}{c} (1 + \rho). \quad (2.23)$$

Как мы уже отмечали, что существует и классическое объяснение. С использованием классической электродинамики Максвелла мы сделаем лишь качественное объяснение явления. Во фронте падающей на поверхность электромагнитной волны на любую заряженную частицу действует сила со стороны электрической составляющей этой волны. Под действием этой силы частица начинает двигаться в направлении, совпадающем с направлением действия силы. При этом на движущуюся частицу со стороны магнитной составляющей электромагнитной волны начинает действовать сила Лоренца. Причём направление этой силы совпадает с направлением вектора Пойнтинга, то есть с направлением распространения волны.

Для простоты будем считать, что скорость частицы пропорциональна приложенному к ней ускорению – нам всё равно интересно лишь направление действия результирующей силы. Процесс в данном случае мы оцениваем чисто качественно. Из определения напряжённости электрического поля получаем, что сила, действующая на заряженную частицу пропорциональна этой самой напряжённости:

$$\bar{E} = \frac{\bar{F}_{Кул.}}{q} \Rightarrow \bar{F} = q\bar{E}.$$

Из II Ньютона получаем значение ускорения

$$\bar{F}_{Кул.} = m\bar{a} \Rightarrow \bar{a} = \frac{\bar{F}_{Кул.}}{m} = \frac{q\bar{E}}{m},$$

и, считая, в первом приближении, движение равномерным, приобретённую скорость частицы:

$$\bar{v} = \bar{a}t = \frac{q\bar{E}}{m}t.$$

Сила Лоренца, действующая на заряженную частицу со стороны магнитного поля равна заряду частицы, умноженному на векторное произведение скорости частицы на вектор магнитной индукции поля:

$$\bar{F}_{Лор.} = q\bar{v} \times \bar{B} = \frac{q^2}{m} \bar{E} \times \bar{B},$$

$$\bar{S} = \bar{E} \times \bar{B},$$

$$\bar{F}_{Лор.} = \frac{q^2}{m} \bar{S},$$

$$\bar{S} \uparrow\uparrow \bar{F}_{Лор.}.$$

Как мы видим, эта сила сонаправлена с вектором Пойнтига и, следовательно, с направлением распространения электромагнитной волны:

В итоге, сила Лоренца, действующая на заряженные частицы со стороны электромагнитной волны и получившие движение в результате действия на них электромагнитной волны будет создавать давление на поверхность, на которую падает волна. Это давление и будет световым давлением.

Для количественного описания мы прибегнем к аппарату всё той же теории относительности. Любая волна, перенося энергию, переносит также и импульс. Этот импульс будет передаваться поверхности, на которую воздействует волна и оказывать на неё давление. Так акустическая или упругая волна будет «давить» на поверхность, от которой она отражается или которой поглощается...

В случае классической механики соотношение между энергией и импульсом будет иметь вид:

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{mv \cdot v}{2} = \frac{pv}{2}.$$

В релятивистском случае мы будем иметь уже знакомое нам соотношение:

$$E_\phi = pc.$$

Поскольку электромагнитная волна, свет движутся со скоростью света, именно оно и будет представлять для нас интерес.

Используя все те же соотношения, что и при выводе формулы через импульс фотона, получаем:

$$P = \frac{F}{S} = \frac{\Delta p}{S \Delta t} = \frac{p}{S \Delta t} (1 + \rho) = \frac{1}{c} \frac{E}{S \Delta t} (1 + \rho) = \frac{E_e}{c} (1 + \rho).$$

Только здесь:

$$\frac{p}{S \Delta t}$$

– плотность потока импульса в волне,

$$\frac{E}{S \Delta t}$$

– плотность потока энергии в волне.

2.3. Экспериментальное подтверждение квантовой природы света

2.3.1. Комptonовское рассеивание

Рассеивание жесткого рентгеновского излучения на образце из парафина. Экспериментально было обнаружено, что у рассеянной волны длина больше. Но, самое главное, увеличение длины волны зависит только от угла рассеяния и ни от чего больше! Найти объяснение этому явлению с классической точки зрения не удалось (*и, вообще, невозможно*). Соотношение между увеличением длины волны и углом рассеяния выглядит следующим образом:

$$\Delta \lambda = \lambda_2 - \lambda_1 = \lambda_c (1 - \cos \theta), \quad (2.24)$$

где

$$\lambda_c = \frac{2\pi \hbar}{m_e c}. \quad (2.25)$$

КОМПТОНОВСКАЯ ДЛИНА ВОЛНЫ.

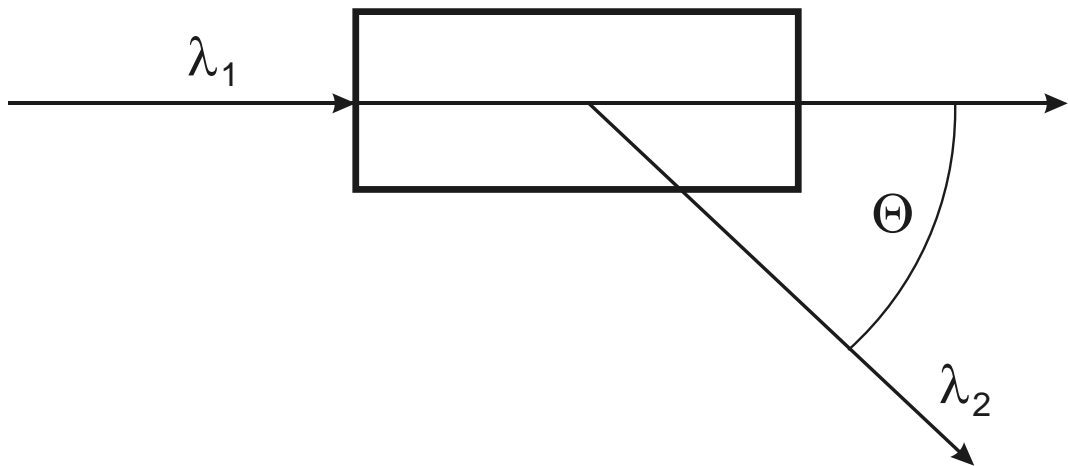


Рисунок 2.8
Эффект Комптона

Эффект объясняется через рассмотрение абсолютно упругого соударения двух частиц – фотона и свободного электрона (образец из парафина – по сравнению с энергией кванта жесткого рентгена электрон на орбитали атома водорода можно считать свободным). Суть явления в двух словах объясняется тем, что частота фотона, а, следовательно, и его длина волны жестко завязаны (по гипотезе Планка) на его энергию. В свою очередь потеря энергии частицы при абсолютно упругом соударении однозначно определяется соотношением масс и углом разлёта частиц. Всё решение получается из рассмотрения законов сохранения импульса и энергии для фотона и электрона, правда в релятивистском виде (фотон – частица, двигающаяся со скоростью света, без ОТО не обойтись!)

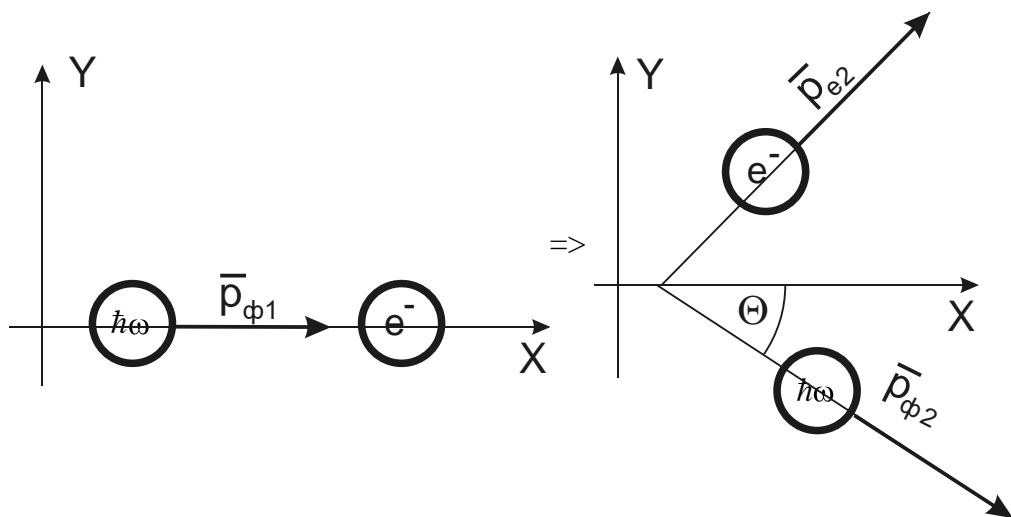


Рисунок 2.9
Абсолютно упругое соударение электрона и фотона в ходе
комптоновского рассеяния

Нам понадобятся следующие соотношения:

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega} \Rightarrow \omega = \frac{2\pi c}{\lambda} \text{ – между частотой и длиной волны,}$$

Преобразованный вариант скалярного квадрата 4-хвектора энергии импульса:

$$\frac{E^2}{c^2} - p^2 = m^2 c^2$$

$$E^2 - c^2 p^2 = m^2 c^4 = \left(\underset{E_0}{mc^2} \right)^2 = E_0^2,$$

где $E_0 = mc^2$ – энергия покоя частицы.

$$\begin{aligned} c^2 p^2 = E^2 - E_0^2 &= (E_0 + T)^2 - E_0^2 = \cancel{E_0^2} + T^2 + 2E_0 T - \cancel{E_0^2} = \\ &= T^2 + 2E_0 T = T(T + E_0), \end{aligned}$$

где $T = \frac{mv^2}{2}$ – кинетическая энергия частицы.

А именно:

$$c^2 p^2 = T(T + E_0).$$

Из закона сохранения энергии:

Для фотона:

$$\left. \begin{aligned} E_{\phi 1} = \hbar \omega_1 = \frac{2\pi \hbar c}{\lambda_1} \\ E_{\phi 2} = \hbar \omega_2 = \frac{2\pi \hbar c}{\lambda_2} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \Delta E = 2\pi \hbar c \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right).$$

Для электрона:

$$E_{e1} = E_0,$$

где $E_0 = m_e c^2$ – энергия покоя электрона.

$$E_{e2} = E_0 + T,$$

где $T = \frac{mv^2}{2}$ – кинетическая энергия электрона отдачи.

Причём эта кинетическая энергия T по закону сохранения равна убыли энергии фотона ΔE :

$$T = \Delta E = 2\pi \hbar c \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right)$$

Из закона сохранения импульса:

$$p_{\phi 1} = \hbar k_1 = \frac{2\pi \hbar}{\lambda_1},$$

$$p_{\phi 1x} = \frac{2\pi \hbar}{\lambda_1},$$

$$p_{\phi 1y} = 0$$

$$p_{\phi 2} = \hbar k_2 = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_2}$$

$$p_{\phi 2x} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_2} \cos \Theta$$

$$p_{\phi 2y} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_2} \sin \Theta.$$

Убыль импульса фотона по оси X :

$$\Delta p_{\phi x} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_1} - \frac{2\pi\hbar}{\lambda_2} \cos \Theta = 2\pi\hbar \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \cos \Theta \right).$$

Импульс электрона до взаимодействия равнялся нулю:

$$p_{e1} = 0$$

После взаимодействия импульс электрона отдачи по оси X равен убыли импульса фотона (по оси X , он у фотона исходно весь по оси X):

$$p_{ex2} = \Delta p_{\phi x} = 2\pi\hbar \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \cos \Theta \right)$$

Импульс электрона отдачи по оси Y равен (с обратным знаком) импульсу фотона оси Y , так исходно по этой оси импульс и фотона и электрона равнялись нулю:

$$p_{ey2} = \Delta p_{\phi y} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_2} \sin \Theta$$

⇒ необходимый минимум...

Левая часть соотношения для импульса и энергии релятивистской частицы:

$$\begin{aligned} c^2 p_{e2}^2 &= c^2 (p_{e2x}^2 + p_{e2y}^2) = \\ &= 4\pi^2 \hbar^2 c^2 \left(\frac{1}{\lambda_1^2} + \frac{1}{\lambda_2^2} \cos^2 \Theta - \frac{2}{\lambda_1 \lambda_2} \cos \Theta + \frac{1}{\lambda_2^2} \sin^2 \Theta \right) = \\ &= 4\pi^2 \hbar^2 c^2 \left(\frac{1}{\lambda_1^2} + \frac{1}{\lambda_2^2} \cos^2 \Theta + \frac{1}{\lambda_2^2} \sin^2 \Theta - \frac{2}{\lambda_1 \lambda_2} \cos \Theta \right) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 4\pi^2 \hbar^2 c^2 \left(\frac{1}{\lambda_1^2} + \frac{1}{\lambda_2^2} \underbrace{(\cos^2 \Theta + \sin^2 \Theta)}_1 - \frac{2}{\lambda_1 \lambda_2} \cos \Theta \right) = \\
&= 4\pi^2 \hbar^2 c^2 \left(\frac{1}{\lambda_1^2} + \frac{1}{\lambda_2^2} - \frac{2}{\lambda_1 \lambda_2} \cos \Theta \right) = \\
&= 4\pi^2 \hbar^2 c^2 \left(\frac{1}{\lambda_1^2} + \frac{1}{\lambda_2^2} - \underbrace{\frac{2}{\lambda_1 \lambda_2} + \frac{2}{\lambda_1 \lambda_2} - \frac{2}{\lambda_1 \lambda_2}}_0 \cos \Theta \right) = \\
&= 4\pi^2 \hbar^2 c^2 \left(\underbrace{\frac{1}{\lambda_1^2} + \frac{1}{\lambda_2^2} - \frac{2}{\lambda_1 \lambda_2}}_{\left(\frac{1}{\lambda_1^2} - \frac{1}{\lambda_2^2}\right)^2} + \frac{2}{\lambda_1 \lambda_2} - \frac{2}{\lambda_1 \lambda_2} \cos \Theta \right) = \\
&= 4\pi^2 \hbar^2 c^2 \left(\left(\frac{1}{\lambda_1^2} - \frac{1}{\lambda_2^2} \right)^2 + \frac{2}{\lambda_1 \lambda_2} - \frac{2}{\lambda_1 \lambda_2} \cos \Theta \right) = \\
&= 4\pi^2 \hbar^2 c^2 \left(\frac{1}{\lambda_1^2} - \frac{1}{\lambda_2^2} \right)^2 + 8\pi^2 \hbar^2 c^2 \frac{1 - \cos \Theta}{\lambda_1 \lambda_2}
\end{aligned}$$

Правая часть соотношения для импульса и энергии релятивистской частицы:

$$T(T + E_0) = 4\pi^2 \hbar^2 c^2 \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right)^2 + 4\pi \hbar c^3 m_e \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right)$$

Окончательно, подставляя полученные выражения в соотношение для импульса и энергии релятивистской частицы, получаем:

$$\begin{aligned}
&\cancel{4\pi^2 \hbar^2 c^2 \left(\frac{1}{\lambda_1^2} - \frac{1}{\lambda_2^2} \right)^2} + 8\pi^2 \hbar^2 c^2 \frac{1 - \cos \Theta}{\lambda_1 \lambda_2} = \\
&= \cancel{4\pi^2 \hbar^2 c^2 \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right)^2} + 4\pi \hbar c^3 m_e \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right)
\end{aligned}$$

$$\sqrt{2\pi^2\hbar^2} \cancel{e^2} \frac{1-\cos\Theta}{\lambda_1\lambda_2} = \cancel{4\pi} \cancel{\hbar} c^{\cancel{\beta}} m_e \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right)$$

$$2\pi\hbar \frac{1-\cos\Theta}{\cancel{\lambda_1\lambda_2}} = cm_e \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\cancel{\lambda_1\lambda_2}}$$

$$\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1 = \frac{2\pi\hbar}{cm_e} (1 - \cos\Theta)$$

Это и есть наша искомая формула.

2.3.2. Ультрафиолетовая граница тормозного рентгеновского излучения

В рентгеновском аппарате («рентгеновская трубка») катод подогревается за счёт цепи накала, что вызывает термоэлектрическую эмиссию. За счёт большой разности потенциалов между катодом и анодом испарившиеся электроны ускоряются и начинают движение к аноду. Цилиндрический электрод, на который подано отрицательное напряжение фокусирует пучок электронов на аноде. Массивный анод принимает на себя удар сильно разогнанных электронов и в результате начинает излучать электромагнитные волны в более коротковолновой части спектра, получившей название *рентгеновского излучением*.

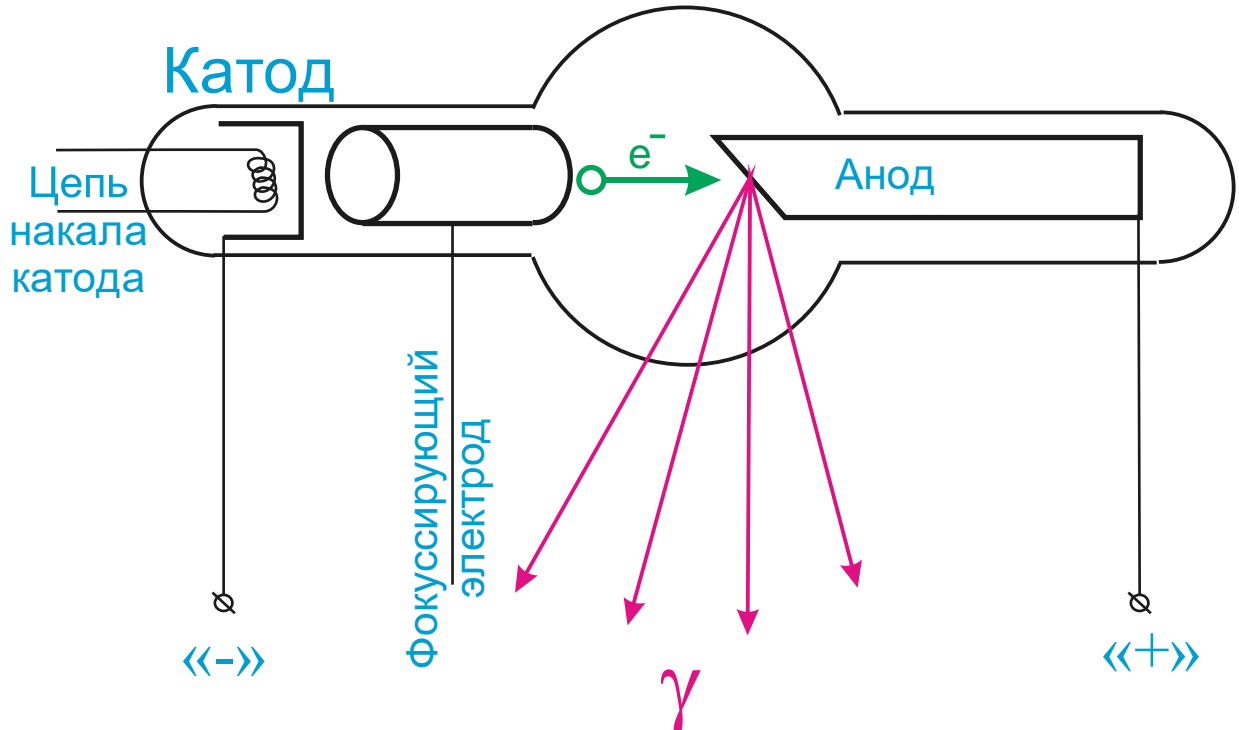


Рисунок 2.10
Рентгеновская трубка

Рентгеновское излучение бывает двух видов: тормозное и характеристическое.

Характеристическое – возникает за счет возбуждения нижних электронных уровней (*электронов нижних орбиталей*) и их последующей релаксацией.

Тормозное – вызвано торможением рентгеновских электронов на поверхности электрода (*анода*).

Было обнаружено, что спектр тормозного рентгеновского излучения резко обрывается в коротковолновой (ультрафиолетовой) части спектра. Поскольку данное излучение вызвано торможением электронов и с классической точки зрения определяется скоростью этого торможения, в спектре должны были бы присутствовать (пусть даже в незначительной степени) сколь угодно большие частоты излучения. Ведь существует вероятность любой скорости торможения. Однако на практике спектр резко обрывается. С квантовой точки зрения это объясняется тем, что энергия излучённого кванта (*фотона*) не может быть больше кинетической энергии электрона, которая, в свою очередь определяется работой электрического поля по ускорению электрона ($A=Ue$, где U – разность потенциалов между катодом и анодом трубки). Тогда имеем условие для частоты ультрафиолетовой границы спектра:

$$\hbar\omega \leq Ue. \quad (2.26)$$

2.3.3. Опыт Боте

Опыт Боте является *первым прямым* и первым неопровержимо прямым *доказательством существования фотонов* – доказательства того факта, взаимодействие электромагнитного излучения с чем бы то ни было носит характер взаимодействия с частицей!

На металлическую фольгу падает слабый пучок рентгеновских лучей (*параллельно плоскости фольги*). Под действием этого излучения фольга флуоресцирует (*явление называется рентгенофлуоресценцией*). В виду слабого потока исходного излучения, фольга испускает лишь отдельные фотоны. Справа и слева от фольги расположены датчики (*газоразрядные счётчики*), которые фиксируют приход сигнала (электромагнитной волны). При этом на ленте самописца остаётся пометка (чёрточка). Если бы речь шла о классической волне и фотонов бы не существовало, то она бы распространялась одинаково что в одну, то и в другую стороны (*сферическая волна*). Датчики срабатывали бы синхронно и отметки на ленте были бы только парные (от одного и другого датчика одновременно). Однако каждый раз в эксперименте срабатывал только один датчик. Это объясняется тем, что в случае, когда фольга испускает только один фотон (*а именно это и было в данном эксперименте*), он может провзаимодействовать только с одним из датчиков и второй датчик уже никак не может на него отреагировать. Это напрямую доказывает существование фотонов, как частиц.

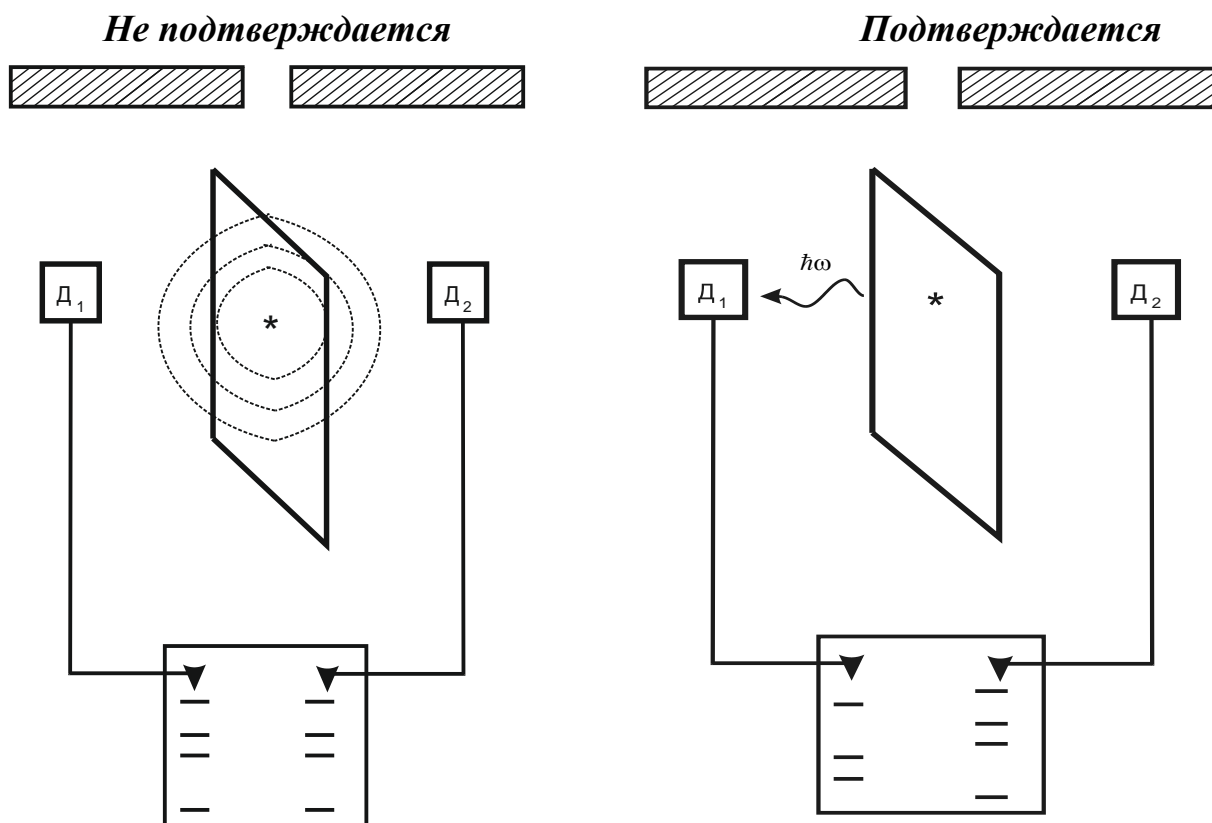


Рисунок 2.11
 Опыт Боте – прямое доказательство существования фотонов

3. Квантовая механика

«Откуда Вы знаете, что, когда Вы отворачиваетесь, столы за вашими спинами не превращаются в кенгуру?..»

Лорд Бертран Рассел

Основной подход квантовой механики, как, и физики, вообще, сводится к тому, чтобы судить о происходящем исходя из наблюдений, а не досужих домыслов. Наблюдая за камнем, брошенным под углом к горизонту, мы судим о его поведении по свету, отражённому от его поверхности и воспринимаемому нашими глазами. Данный процесс есть постоянное взаимодействие камня с электромагнитной волной либо с потоком фотонов (в зависимости на каких позициях в данный момент мы стоим – позициях классической физики или квантовой механики). Однако данное взаимодействие вряд ли окажет существенное влияние на поведение камня, следующее наблюдаемое его состояние. Когда речь идёт о квантовом мире каждый такой акт взаимодействия приведёт к переходу системы из одного состояния в другое, не эквивалентное предыдущему. Таким образом, мы сможем говорить лишь о наблюдении состояний, в которых произошло то или иное взаимодействие, а не о процессах, происходящих в промежутки времени между ними. Допустим, мы будем проводить последовательные эксперименты по наблюдению квантового объекта на разных стадиях, повторяя снова и снова один и тот же эксперимент точь-в-точь. Однако, то, что происходило каждый раз с этим объектом в промежутки между нашими взаимодействиями так и останется для нас загадкой.

Таким образом, мы выберем следующий подход: будим судить о квантовом объекте по тем состояниям, в которых мы обнаружили его в результате того или иного взаимодействия и не будем вдаваться в подробности того, что происходило с ним в промежутке времени между этими взаимодействиями. В том смысле, что мы не будем пытаться образно представить процесс движения, перемещения объекта или перехода его из одного состояния в другое. Мы ограничимся математическим описанием этого процесса в том смысле, что будем искать выражения, а, как мы вскоре покажем, операторы, переводящие нашу квантовую систему (уравнение, описывающее нашу квантовую систему) из одного состояния в другое. И не будем пытаться представить за этими действиями какой-либо конкретный образ. Нас будет удовлетворять то, что, наблюдая объект в каком-либо состоянии, благодаря этим уравнениям, операторам, мы сможем предсказать следующее состояние нашего объекта, которое может быть обнаружено экспериментально (точнее, вероятность того или иного состояния). Ведь сам процесс перехода из одного состояния в другое, движения из одной точки в другую, *не может наблюдаться нами принципиально* – любое наблюдение станет следующим актом взаимодействия. А *«откуда Вы знаете, что, когда*

Вы отворачиваетесь, столы за вашими спинами не превращаются в кенгуру?..»

Отметим ещё один момент. Весьма частое заблуждение – это форма исследуемого объекта. Если речь идёт о теле макро-величины, рассматриваемом в макрообъёме, то всё становится более-менее понятно. Каждая точка тела есть некая точка взаимодействия данного тела с окружающей среде. Другое дело в квантовом мире. Математическое понятие точки в данном случае будет соответствовать точке взаимодействия двух квантовых объектов в физическом пространстве. Однако, эта точка является лишь характеристикой взаимодействия и не является характеристикой формы/объёма данного объекта. Во вторых, эта точка есть объект вероятностный – с той или иной вероятностью (определяемой квадратом модуля Ψ -функции) взаимодействие может произойти в той или иной точке. А это уже характеристика, скорее, поля, заполняющего с той или иной плотностью некий объём пространства, а не тела, имеющего некую форму.

И ещё. Вводя понятие волны в предыдущей части курса, мы сказали, что волна – это процесс и не является материей. Мы по прежнему стоим на этой точке зрения. И предыдущие рассуждения лишь подтверждение этого подхода. Мы будем говорить о квантовом объекте, как о виде материи, говоря о взаимодействии (*о корпускулярных свойствах*), и говорить о нём, как о процессе перехода его из одного состояния в другое, то есть о волне в промежутках между взаимодействиями.

3.1. Гипотеза де Бройля

3.1.1. Волна де Бройля

Де Бройль предположил (1924 г.), что если с электромагнитной волной можно связать поток частиц, то с потоком частиц можно связать некоторую волну. За исходную формулу было взято выражение для импульса фотона (см. «Импульс фотона», (2.12) и (2.13)). Однако, вместо импульса фотона, однозначно определяемого энергией фотона и направлением распространения электромагнитной волны, было взято обыкновенное, классическое (*ну, либо, релятивистское для больших скоростей*) выражение – произведение массы на скорость движения. (*Для справки, для фотона подобное выражение имеет чисто формальный смысл*).

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad , \quad (3.1)$$

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} \quad . \quad (3.2)$$

Вопрос о виде этой волны оставался открытым (*в смысле, волна чего?*).

На сегодняшний день считается, что волна, связанная с потоком частиц есть волна абстрактной Ψ -функции. Физический смысл Ψ -функции на сегодняшний день неизвестен. Смысл имеет квадрат модуля этой функции. Квадрат Ψ -функции есть плотность вероятности обнаружить частицу в той или иной области пространства.

Замечание: конкретно под волной де Бройля здесь и в дальнейшем мы будем понимать волну следующего вида:

$$\Psi = \Psi_0 e^{i\left(\frac{p_x}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)} \quad (3.3)$$

Считается, что данная волна является сугубо комплексной, т.е. не может быть представлена в не комплексной форме. Физический смысл этой волны будет рассмотрен ниже.

Групповая и фазовая скорость волны де Бройля. Для расчёта этих параметров воспользуемся соотношениями:

$$v_{гр.} = \frac{d\omega}{dk} \quad \text{и} \quad v_{фаз.} = \frac{\omega}{k}.$$

При этом учтём, что для волны де Бройля, как и для фотона:

$$E = \hbar\omega \Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar},$$

$$p = \hbar k \Rightarrow k = \frac{p}{\hbar}.$$

Для групповой скорости:

$$v_{гр.} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\left(\frac{E}{\hbar}\right)}{d\left(\frac{p}{\hbar}\right)} = \frac{\frac{1}{\hbar}dE}{\frac{1}{\hbar}dp} = \frac{dE}{dp}.$$

Чтобы вычислить значение dE/dp , воспользуемся выражением для скалярного квадрата 4-вектора энергии-импульса:

$$m_0^2 c^2 = m^2 c^2 - p^2,$$

$$\left(m_0^2 c^2 = \frac{1}{c^2} m^2 c^4 - p^2 \right).$$

Выразим из него энергию:

$$m_0^2 c^2 = \frac{E^2}{c^2} - p^2,$$

$$E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2$$

Либо последнее выражение можно получить сразу из значения инварианта:

$$m_0^2 c^4 = E^2 - p^2 c^2.$$

В любом случае величина энергии в выражении через импульс будет:

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

Теперь вычислим искомую производную:

$$\begin{aligned} v_{gp.} &= \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}} \cdot \frac{d(m_0^2 c^4 + p^2 c^2)}{dp} = \\ &= \frac{\cancel{2} p c^2}{\underbrace{\cancel{2} \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}}_E} = \frac{p c^2}{E} = \frac{p \cancel{c^2}}{m \cancel{c^2}} = \frac{p}{m} = \frac{\cancel{m} v}{\cancel{m}} = v. \end{aligned}$$

Таким образом, групповая скорость волны де Бройля совпадает со скоростью движения частицы. И это вполне очевидно, в противном случае вся теория теряла бы свой смысл: групповая скорость волны есть скорость её распространения. Если бы частица и волна распространялись бы с разной скоростью, их нельзя было бы рассматривать совместно, как проявление одной и той же сущности.

Теперь разберёмся с фазовой скоростью. Из релятивистской формулы связи между массой и энергией с одной стороны и формулы связи между частотой и энергией с другой, получаем:

$$\left. \begin{aligned} E &= mc^2 \\ E &= \hbar \omega \end{aligned} \right\} \Rightarrow mc^2 = \hbar \omega,$$

$$\omega = \frac{mc^2}{\hbar}.$$

Из связи импульса со скоростью по определению и связи импульса с волновым числом получаем:

$$\left. \begin{aligned} p &= mv \\ p &= \hbar k \end{aligned} \right\} \Rightarrow mv = \hbar k,$$

$$k = \frac{mv}{\hbar}.$$

Обратите внимание, что и в том, и в другом случае речь идёт о релятивистской массе, а не о массе покоя и выражения имеют релятивистский смысл. Напомним, что исходно теория уходит корнями в описание свойств фотона – релятивистской частицы и без теории относительности (СТО) здесь явно не обойтись.

Подставив в формулу для фазовой скорости, находим окончательное выражение:

$$v_{\text{фаз.}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar \cdot mc^2}{mv \cdot \hbar} = \frac{c^2}{v}.$$

Обратите внимание, фазовая скорость для волны де Бройля не совпадает с групповой. А это значит, что эта волна будет испытывать дисперсию (*её фазовая скорость будет зависеть от частоты*). Причём это свойство не будет следствием взаимодействия волны со средой (*с веществом*), как для электромагнитной волны. Волна де Бройля будет испытывать дисперсия даже при распространении в вакууме! Таким образом, волновой пакет, «набранный» из волн де Бройля будет «расплываться» быстрее, чем за 10^{-26} с. Это приводит к невозможности описанию частицы, как целиком состоящей из волнового пакета, созданного, скажем, в пределах неопределённости частот в соответствии с принципом неопределённости Гейзенберга.

Отметим отдельно, что для фотона дисперсия будет отсутствовать. Это очевидно. Все выкладки, в принципе, подходят и для него. Однако надо учесть, что его скорость всегда будет равна скорости света в вакууме. Тогда:

$$v = c \Rightarrow v_{\text{гр.}} = v = c, \quad v_{\text{фаз.}} = \frac{c^2}{v} = \frac{c^2}{c} = c, \quad v_{\text{гр.}} = v_{\text{фаз.}}.$$

Таким образом, волна, связанная с движением фотона не будет испытывать дисперсию. Что же касается дисперсии электромагнитной волны при взаимодействии с веществом, то здесь речь идёт о суперпозиции всех волн всех фотонов, которые при этом будут поглощаться и переизлучаться атомами. В итоге результирующая волна, действительно, будет иметь фазовую и групповую скорости отличные от скорости света в вакууме.

Что же касается волн де Бройля, то определяющую роль здесь будет иметь тот факт, что в отличии от фотонов, которые всегда движутся со скоростью c , частицы движется с различными скоростями и именно эти скорости определяют их длину волны. Напомним, что это единственная волна, испытывающая дисперсию в при движении в вакууме и, таким образом, взаимодействующая при этом только с самим вакуумом.

3.1.2. Экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля

Дэвиссон и Джермер в 1927 году провели эксперименты по дифракции электрона на кристалле никеля (*дифракция отражения на монокристаллической решётке*).

У монокристалла никеля кубической формы был спилен один угол (*одна вершина куба*). На отшлифованную поверхность спила направлялся «луч» – поток электронов из электронной пушки. Датчик, сигнал от которого поступал на гальванометр, мог фиксировать отражённый поток под разными

углами. К тому же сам кристалл мог вращаться относительно оси, перпендикулярной рассматриваемой плоскости.

Картинка для каждого угла отражения и скорости (*кинетической энергии*) электрона повторялась три раза при повороте кристалла относительно оси вращения на 360° . Это соответствует симметрии кристалла в данной плоскости (*если бы мы рассматривали в качестве плоскости отражения грань кристалла, картинка должна была бы повториться четыре раза, так как квадрат при повороте на угол 360° 4 раза совпадёт сам собой*). Это позволило сориентировать кристалл в процессе эксперимента относительно положения кристаллической решётки.

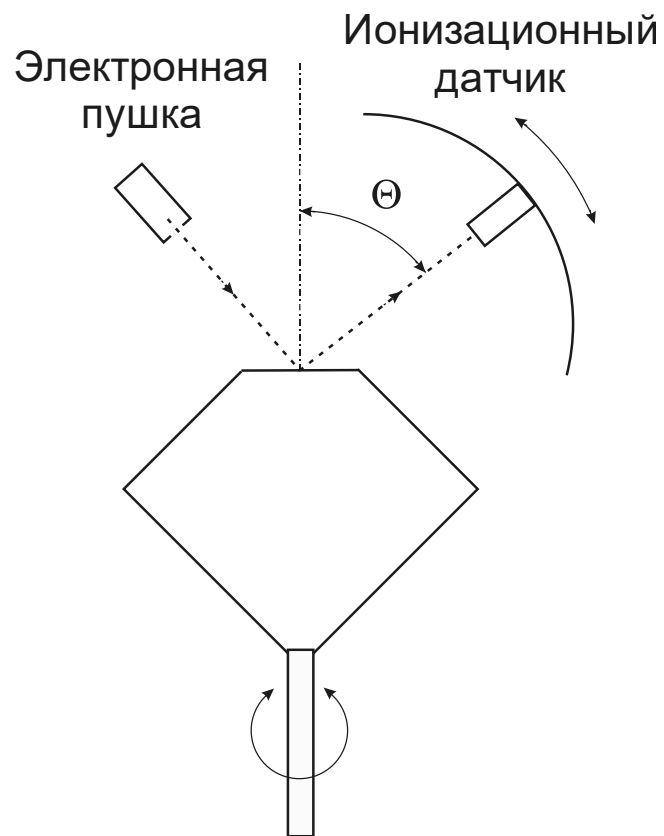


Рисунок 3.1
Опыт Дэвиссона и Джермера

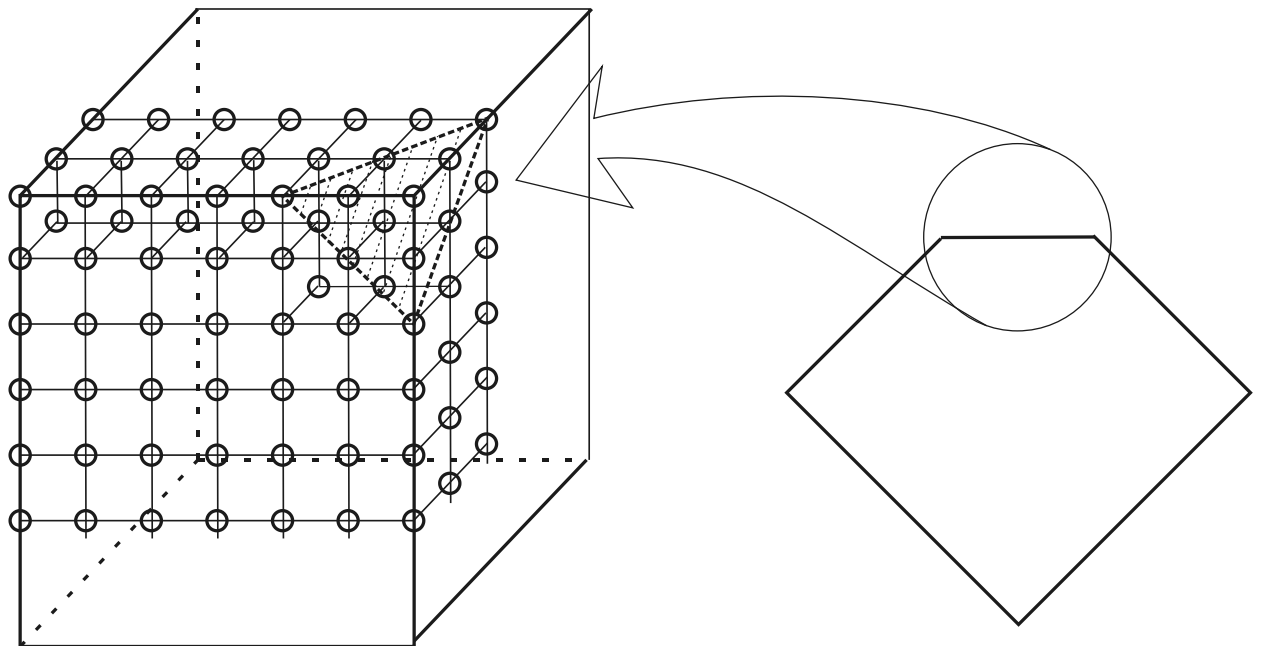


Рисунок 3.2
Схема обработки кристалла никеля

По результатам эксперимента длина волны $\lambda=0.165$ нм (Брэгговская длина волны, $2d \sin \vartheta = n\lambda$ – формула, применяемая для расчёта дифракции рентгеновских лучей на кристаллах, где за период решётки берётся расстояние между слоями атомов, уже экспериментально доказанная к тому времени). Длина волны де Бройля – $\lambda=0.167$ нм. Как видим, различие всего в две тысячных нанометра (1.2%) не оставляет сомнения, что утверждение де Бройля абсолютно верно!

За тем эксперименты Томсона и независимо от него Тартаковского по дифракции электрона через металлическую фольгу (золотая и серебряная фольга, поликристаллическая решётка, дифракция пропускания). Явление дифракции так же подтвердилось.

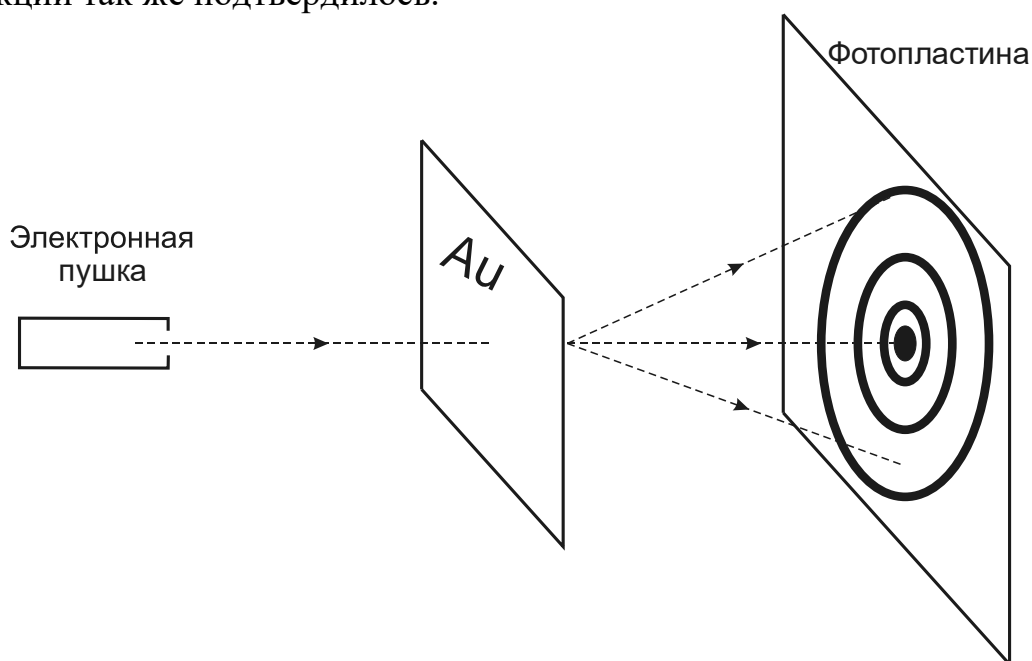


Рисунок 3.3

Опыт по дифракции электронов на золотой фольге

Из результатов наблюдения, так же как и из наблюдения дифракции рентгеновских лучей на той же кристаллической решётки, можно вычислить, в частности, постоянную кристаллической решётки (*подробно см. курс рентгеноструктурного анализа ☺*). Оказалось, что вычисленные тем и другим способом величины совпадают.

Более поздние эксперименты: дифракция монохроматизированного потока молекул водорода **H₂** и атомов гелия **He** на монокристалле, в частности, фтористого лития **LiF** (*дифракция отражения*). *Монохроматизированного* – поток молекул в любом случае имеет тепловой разброс скоростей. Для более чёткой дифракционной картины из него выделяются молекулы с близкими скоростями путём пропускания через систему двух вращающихся дисков с прорезями, смещёнными относительно друг друга. В этом случае пройдут только те молекулы, что за время поворота дисков на угол смещения успеют долететь от первого диска до второго.

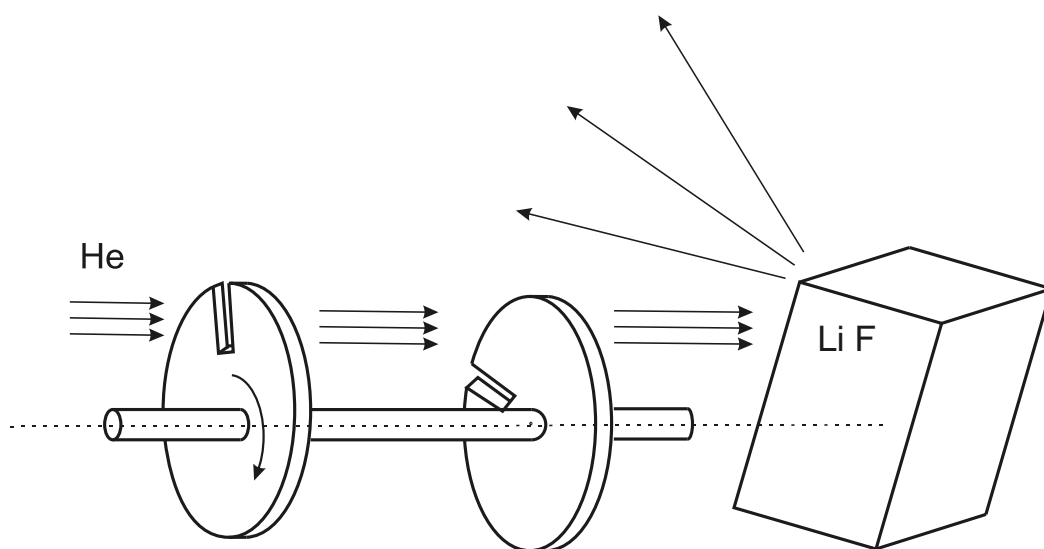


Рисунок 3.4

Эксперимент по дифракции водорода и гелия

Так же дифракция пучка тепловых нейтронов от ядерного реактора на крупном монокристалле. Для регистрации фотопластинка покрывается индиевой фольгой. Ядерная реакция с участием нейтрона и атома индия вызывает появление γ -кванта (фотона большой энергии), который и засвечивает фотопластину.

3.1.3. Сравнительное рассмотрение дифракции света и электрона

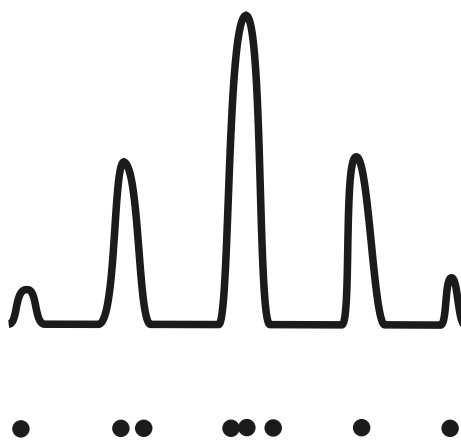


Рисунок 3.5

Последовательное наблюдение дифракции фотонов и электронов

Пусть через дифракционную решётку проходит световой поток. Интенсивность засветки фотобумаги/фотопластинки можно условно описать кривой, изображённой в верхней части картинке (см. «1.2.10. Дифракционная решётка»). Но, если же мы через ту же решётку будем пропускать свет в виде отдельных фотонов (скажем, как в опыте Боте), на бумаге или пластинке мы увидим отдельные засвеченные точки – точки взаимодействия фотонов с фотоприёмником. Однако в местах где должна быть большая интенсивность

в случае интенсивного потока, точек взаимодействия будет больше. Если мы будем продолжать эксперимент достаточно долго, результат, опять-таки, станет таким, как мы видим на верхней картинке.

Если мы будем рассматривать дифракцию электрона на подходящей дифракционной решётки (скажем, опыты Томсона по дифракции электрона на золотой фольге), и будем посылать по одному электрону с некоторой периодичностью, мы увидим то, что изображено на нижней картинке. Со временем накопление отдельных точек приведёт к тому, что картинка будет выглядеть так, как на верхнем рисунке. Если же поток электронов будет достаточно мощный, картина сразу покажется нам похожей на прохождение света через дифракционную решётку.

Вывод состоит в том, что и для света и для потока частиц, с квантово-механической точки зрения, дифракция и интерференция сводятся к дифракции и интерференции отдельных частиц (фотонов, электронов и т.д.), результатом которой является перераспределение вероятности их попадания в то или иное место. А общая картина (как то, что мы ассоциируем с дифракцией и интерференцией волн на поверхности воды) есть накопление статистического (*вероятностного*) поведения отдельных частиц (*и квантов поля в том числе*).

3.2. Волновая функция

3.2.1. Понятие волновой функции

После высказывания де Бройлем его гипотезы, написание общего представления волны и экспериментального доказательства ее существования встал вопрос о физическом смысле этой волны. (В случае корпускулярной теории света вопрос не стоял. Волна электромагнитная, но может быть представлена как поток частиц. В данном случае поток частиц сложно представить как волну).

Возможные варианты:

1) *волна-пилот (при движении частицы по пространству волны расходятся как при движении корабля по глади волны). Модель не проходит: дифракция волны-пилота не приведет к перераспределению плотности потока частиц. Однако экспериментально наблюдается, что результат дифракции волны де Бройля приводит к изменению плотности потока электронов в том или ином направлении.*

2) *частица – есть волна*

а) представление частицы в виде солитона (аргумент против: солитон сам ведет себя как частица).

б) представление частицы как волнового пакета (аргумент против: из-за нулевой дисперсии волновой пакет должен «расплываться»).

«расплываться» - волны с разной частотой будут двигаться с разной скоростью: одни волны отстанут от других, и вместо волнового

пакета будем иметь набор волн разных частот в разных точках пространства.

Замечание: попытки найти решение и доказательства вариантов трактовки 2а и 2б продолжаются до сих пор. Абсолютного доказательства их нежизнеспособности не существует.

3) (**Копенгагенская концепция**) волна – есть волна вероятности обнаружить частицу в некоторой точке пространства. Более конкретно: волна – есть волна абстрактной математической комплексной **Ψ -функции (волновой функции)**, физический смысл и свойства которой будут изложены ниже).

Именно на третьей позиции мы и остановимся, считая её единственной соответствующей реальному положению вещей.

3.2.2. Физический смысл Ψ -функции

Физический смысл (известный физический смысл) имеет амплитуда Ψ -функции: квадрат модуля (амплитуды волны) Ψ -функции есть плотность вероятности обнаружить частицу в той или иной точке пространства. Более точно: квадрат модуля комплексного числа может быть вычислен, как произведение его самого на комплексно-сопряжённое число. Таким образом, произведение ее самой на комплексно-сопряженное значение есть плотность вероятности обнаружить частицу в той или иной точке пространства.

Напомним, что вероятность обнаружения, в этом случае, вычисляется, как интеграл по объёму от плотности вероятности, т.е. от произведения Ψ -функции на её комплексно-сопряжённую:

$$f(x, y, z) = |\psi|^2 = \psi \cdot \bar{\psi} = \psi_0^2, \quad (3.4)$$

$$\psi = \psi(x, y, z, t)$$

(квадрат – потому что, во-первых, нет смысла извлекать квадратный корень, во-вторых, для фотона амплитудное значение перед экспонентой есть E – напряжённость электрического поля и в уравнение для энергии оно входит в виде квадрата).

Так же напомним:

Если

$$z = a + ib = \rho \cdot e^{+i\varphi}$$

– комплексное число, то

$$\bar{z} = a - ib = \rho \cdot e^{-i\varphi}$$

– его комплексно-сопряжённое число. Тогда:

$$|z| = |\bar{z}| = \sqrt{z \cdot \bar{z}} = \rho$$

– модуль этого числа.

Плотность вероятности:

$$f(x, y, z) = \frac{dP_V}{dV}$$

Более точно:

$$f(x, y, z) = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{P_{(V)}}{V} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{P_{(Sphere(x, y, z), \delta)}}{4/3 \pi \delta^3}$$

где $Sphere(x, y, z)$, δ – шар, с центром в точке (x, y, z) и радиуса δ ,

$P_{(Sphere(x, y, z), \delta)}$ – вероятность обнаружить частицу в пределах данного шара.

Фаза волновой функции не является наблюдаемой величиной (или просто «наблюдаемой», подробности о «наблюдаемых» и наблюдаемых величинах будут ниже). Физический смысл фазы до сих пор непонятен (неизвестен).

В итоге имеем:

$$P_{V_1}(t) = \int_{V_1} \psi \cdot \bar{\psi} dV \quad (3.5)$$

– вероятность обнаружить частицу в области пространства V_1 в момент времени t ,

$$dP_V = \psi \cdot \bar{\psi} dV \quad (3.6)$$

– элементарная вероятность обнаружения частицы в элементарном объёме V (в общем случае, в момент времени t).

3.2.3. Свойства Ψ -функции

- 1) Гладкость (ее непрерывность и непрерывность ее первой производной). Это следует из общего физического понимания свойств волн и движения частиц. Они сами и их параметры не могут изменяться мгновенно, а скорость частицы (речь о первой производной) может меняться за некоторое время, пока частица проходит некоторое расстояние (поскольку является следствием действия силы). Ну и так далее.
- 2) Конечность. В противном случае мы можем получить, рассчитав интеграл от плотности вероятности, что частица плотностью локализована в какой-то точке. Но это не возможно даже с классической точки зрения, так как точка не имеет размера, вероятность обнаружить где-нибудь точку («попасть в неё иголкой»...) бесконечно мала и т.д.
- 3) Однозначность (имеет отношение к комплексным вычислениям). Имеется ввиду, что она не должна быть многолистной – при обороте

фазы на 2π функция не должна менять своё значение в той же точки, что вполне допустимо для комплексных функций. Последнее надо пояснить отдельно:

$$z = a + bi = \rho e^{i\varphi}$$

Выше приведены два представления комплексного числа. a и b – реальная и мнимая части числа, ρ и φ – его модуль и фаза. В принципе, два комплексных числа, фаза которых отличается на 2π , являются равными друг другу. Однако, если в какой-либо функции в зависимости от аргумента меняется фаза, то, пройдя полный оборот, функция может принять новое значение. Такие функции называются многолиственными. Однако, в данном случае речь идёт о волне, причём в смысле понимания её, как распространения периодического процесса. В этом случае мы должны потребовать, чтобы пройдя целый оборот (*один цикл колебаний и т.д.*), волновая функция вернулась к прежнему значению.

Условия нормировки:

$$\int_{\infty} \psi \cdot \bar{\psi} dV = 1. \quad (3.7)$$

Это свойство любой плотности вероятности – интеграл по всей области определения равен единицы, т.е. является достоверным событием.

Замечание. Обратите внимание, что, на самом деле, в данном утверждении для плотности вероятности вместо бесконечности должна стоять область определения функции. Таким образом, если частица гарантированно сосредоточена в некой ограниченной области пространства – по ней и надо реально брать интеграл. *Пример.* Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме – единице будет равен интеграл по объёму (*или длине для одномерного случая*) этой ямы.

В самом деле, если интеграл от Ψ -функции является вероятностью обнаружения частицы, то взяв его по всей возможной области её нахождения мы должны получить единицу – ну где-то, в конце концов, она, всё-таки, находится!

3.3. Краткая теория операторов

В случае правильного и последовательного построения курса (в случае достаточного объёма и отведённого на него времени) мы должны были бы сначала построить, не используя теории операторов, уравнение Шредингера, прийти к понятию собственных значений оператора энергии и свойства суперпозиции волновой функции (как следствия решения уравнения Шредингера). Разобрав всё это на примерах, мы должны были бы прийти к пониманию того факта, что все эти действия лежат в рамках расширения **теории вычисления собственных чисел и собственных векторов линейного оператора линейной алгебры на бесконечномерные Гильбертовы пространства вычисления спектра оператора**. После этого мы должны были бы разобрать материал этого раздела и провести последовательное построение всех тех же структур и свойств (нестационарное и стационарное уравнения Шредингера, собственные значения и оператора, собственные функции, свойство суперпозиции) уже базируясь на теории операторов, рассматриваемой в данном разделе. *При желании вы можете проделать это самостоятельно*. Вывод нестационарного уравнения Шредингера без использования теории операторов приведён в конце соответствующего раздела («Уравнение Шредингера» – «Общий вид (нестационарное)»). Вывод стационарного уравнения Шредингера вообще не основано на теории операторов, за исключением последней части раздела, где рассматривается сходство поставленной задачи с задачей на поиск собственных значений. В разделе «Принципы квантовой механики» стоит рассмотреть первый раздел «Простейший подход и наводящие соображения». Необходимо разобрать одну классических задач на решение уравнения Шредингера, точнее «Частица в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме» (там так же не содержится материала, касающегося теории операторов). **И только после этого перейти к изучению изложенного здесь материала и далее по тексту.**

Пропустить теорию операторов.

Сначала вспомним, что такое функция. *Функция – отображение множества X на множество Y :*

$$f : X \rightarrow Y , \\ f(x) = y .$$

Она сопоставляет одному числовому значению другое (*функция на множестве чисел, школьный вариант*):

$$f(x) = x^2 : \\ 2 \rightarrow 4 \\ 3 \rightarrow 9 \\ 4 \rightarrow 16$$

Оператором называется отображение множества функций на множество функций, т.е. сопоставление одной функции другой:

$$\hat{Q} : f_1(x) \rightarrow f_2(x)$$

Среди всех операторов особое значение имеют линейные операторы (*операторы, отвечающие свойствам линейности*):
в общем случае (скажем, для матриц)

$$A : A\left(\sum \alpha_i a_i\right) = \sum \alpha_i A(a_i), \alpha_i,$$

для оператора

$$\hat{Q}: \hat{Q}\left(\sum \alpha_i f_i(x)\right) = \sum \alpha_i \hat{Q}(f_i(x)).$$

Упрощая изложение, можем сказать, что эти операторы должны обладать свойством

– ассоциативности:

$$A(a+b) = A(a) + A(b)$$

и

– дистрибутивности:

$$A(\alpha a) = \alpha A(a).$$

Линейные операторы (примеры):

$$\frac{d}{dx}$$

– Оператор дифференцирования является линейным оператором:

$$f(x) = x^2$$

$$\frac{d(f(x))}{dx} = \frac{d(x^2)}{dx} = 2x \Rightarrow x^2 \rightarrow 2x$$

$$f(x) = 2x^3$$

$$\frac{d(f(x))}{dx} = \frac{d(2x^3)}{dx} = 6x^2 \Rightarrow 2x^3 \rightarrow 6x^2$$

$$f(x) = \ln x$$

$$\frac{d(f(x))}{dx} = \frac{d(\ln x)}{dx} = \frac{1}{x} \Rightarrow \ln x \rightarrow \frac{1}{x}$$

Другие линейные операторы:

$$\frac{\partial}{\partial t}; \quad \frac{\partial}{\partial x}; \quad \frac{\partial}{\partial y}; \quad \frac{\partial}{\partial z}; \quad \nabla; \quad \text{rot.}$$

Любой линейный оператор в каком-то смысле можно представить матрицей, пусть даже бесконечномерной (более точно: матрицы – это способ представления одного из классов линейных операторов, линейных операторов на конечномерных линейных пространствах, то есть векторных пространствах, см. курс линейной алгебры).

Операторное представление физических величин.

Вычисление любой физической величины можно представить как действие некоего оператора на некую функцию. Конкретнее, из определения импульса следует:

$$\left. \begin{array}{l} \bar{p} = m\bar{v} \\ \bar{v} = \frac{d\bar{r}}{dt} \end{array} \right\} \Rightarrow \bar{p} = m \frac{d}{dt} \bar{r}$$

Оператор $m \frac{d}{dt}$ действует на радиус-вектор.

Для кинетической энергии:

$$E = \frac{m\bar{v}^2}{2} \Rightarrow E = \frac{m \left(\frac{d}{dt} \bar{r} \right)^2}{2}$$

Оператор $\frac{m \left(\frac{d}{dt} \right)^2}{2}$ действует на радиус-вектор.

Перейдём к операторам в квантовой механике. Если, когда речь идёт о брошенном под углом к горизонту камне, у нас есть объект и отдельно его параметры: скорость, координаты, импульс, то уже при рассмотрении колебаний все параметры вычисляются только исходя из уравнения данного процесса (так как речь идёт о процессе, а не об объекте и ничего кроме уравнения у нас нет). Так, если речь идёт о гармонических колебаниях

$$x = A \cos(\omega t + \varphi_0),$$

то импульс будет вычисляться, как

$$p = m \frac{d}{dt}(x) = m \frac{d}{dt}(A \cos(\omega t + \varphi_0)) = -mA\omega \sin(\omega t + \varphi_0).$$

Тогда мы можем считать, что

$$p_x = \hat{p}_x x,$$

где

$$\hat{p} = m \frac{d}{dt}.$$

Заметим, также, что для вычисления импульса мы использовали уравнение колебательного процесса и один внешний параметр масса (точнее, масса покоя). Причём этот параметр, масса никак не меняется при изменении

состояния системы. Таким образом (по крайней мере, в примере вычисления импульса) всё описание состояния системы, все детали этого состояния содержались в самом уравнении.

И так, сделаем вывод. Поскольку волновые свойства описывают процесс, происходящий с объектом, а не сам объект, будем пытаться извлечь необходимые нам параметры из уравнения. Поскольку ничего, кроме ψ -функции у нас нет, будем пытаться извлечь необходимые нам параметры (импульс, энергию, координаты...) из самого уравнения ψ -функции. ψ -функция – это всё, что мы знаем и можем знать о нашем объекте в процессе его движения. Оператор соответствующей величины должен извлекать величины из уравнения самой ψ -функции, и максимум, что нам понадобится, это такой параметр, как масса. И вспомним ещё раз, мы не знаем шкафы или кенгуру находятся за нашими спинами. Будим, всего лишь, искать уравнения (точнее операторы), связывающие начальную и конечную информацию.

Замечание. И ещё. В результате нашей деятельности мы получим операторы, действие которых на ψ -функцию будет давать произведение значения величины на саму ψ -функцию. В первом приближении это можно пояснить так: поскольку речь не идёт о какой-либо локализации, мы можем лишь получить значение, умноженное на некую функцию его распределения – размазанности по объёму. Вычисление же при этом среднего его значения или других экспериментально получаемых параметров, является стандартной для квантовой механики процедурой, которая, тем не менее, выходит за рамки нашего курса (воздействие операторных скобой из кет и бра векторов).

Найдем операторы импульса и энергии в квантовой механике.

Для нахождения оператора проекции импульса на ось x продифференцируем уравнение волны де Бройля по x :

$$\psi = \psi_0 e^{i\left(\frac{p_x}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \underbrace{\psi_0 e^{i\left(\frac{p_x}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)}}_{\psi} \cdot i \frac{p_x}{\hbar} = \psi i \frac{p_x}{\hbar} = \frac{i}{\hbar} \cdot p_x \psi \Rightarrow$$

$$\Rightarrow p_x \psi = \frac{1}{i} \hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi = \hat{p}_x \psi$$

Причём, мы учли, что:

$$i^2 = i \cdot i = -1 \Rightarrow i = -\frac{1}{i} \Rightarrow -i = \frac{1}{i}$$

Замечание. Учтём тот факт, что мы, по существу, получим гораздо больше, чем хотели. Мы пытались вычислить оператор – способ вычисления проекции импульса на ось, а получили то, что сам импульс эквивалентен действию некоторого оператора на ψ -функцию – действие оператора эквивалентно умножению волновой функций на какое-то число. Но об этом мы поговорим *позже*...

Для нахождения оператора энергии продифференцируем уравнение волны де Бройля по t :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \underbrace{\psi_0 e^{i\left(\frac{p_x x - E t}{\hbar}\right)}}_{\psi} \cdot \left(-i \frac{E}{\hbar}\right) = -\psi i \frac{E}{\hbar} = -i \frac{1}{\hbar} \cdot E \psi \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E \psi = -\frac{1}{i} \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -(-i) \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{E} \psi$$

В итоге, операторы проекции импульса на оси x, y, z :

$$\hat{p}_x = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (3.8)$$

$$\hat{p}_y = -i \hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad (3.9)$$

$$\hat{p}_z = -i \hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (3.10)$$

Оператор энергии:

$$\hat{E} = i \hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (3.11)$$

Не надо думать, что приведённые нами выкладки есть полное доказательство того факта, что данные операторы действительно являются операторами данных величин. В книге Дирака «Лекции по квантовой механике» на доказательство каждого такого факта (*каждого оператора*) отводится по одному параграфу. Мы лишь показали, что данные операторы вполне могут претендовать на роль операторов этих величин. Точное доказательство оставим за бортом нашего курса.

Ещё несколько операторов, которые понадобятся нам в ближайшем будущем:

Операторы координат x, y, z :

$$\hat{x} \psi = x \cdot \psi \Rightarrow \hat{x} = x. \quad (3.12)$$

$$\hat{y} \psi = y \cdot \psi \Rightarrow \hat{y} = y. \quad (3.13)$$

$$\hat{z} \psi = z \cdot \psi \Rightarrow \hat{z} = z. \quad (3.14)$$

Оператор потенциальной энергии:

$$\hat{U}\psi = U \cdot \psi \Rightarrow \hat{U} = U. \quad (3.15)$$

Оператор проекции момента импульса на ось \mathbf{z} :

$$\hat{L}_z\psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \Rightarrow \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.16)$$

Оператор скалярного квадрата (*абсолютной величины*) момента импульса:

$$\hat{L}^2 = -i\hbar \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \Theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right) \quad (3.17)$$

3.4. Уравнение Шредингера

Без теории операторов

3.4.1. Общий вид (не стационарное уравнение)

Венцом любой теории (*физической теории*) является уравнение или система уравнений решением которого (*которой*) будут все основные законы и уравнения, относящиеся к данной теории. Так *II закон Ньютона* является дифференциальным уравнением второго порядка, из которого можно получить все уравнения движения классической механики:

$$\frac{d}{dt}(m\bar{v}) = \bar{F} \text{ либо } \frac{d^2}{dt^2}(m\bar{r}) = \bar{F}.$$

Апофеозом классической теории электромагнетизма является система 4-х уравнений в частных производных – система уравнений Максвелла.

Мы будем искать уравнение, решением которого для соответствующего случая (случая стационарного движения ни с чем не взаимодействующей частицы) будет волна де Бройля. Именно этим вопросом задалось научное сообщество после доказательства реальности существования волны де Бройля. И именно оно было написано Шредингером в 1925 году. Вот это уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (3.18)$$

Оно позволяет найти ψ -функцию для любой частицы в условиях не релятивистской механики.

С точки зрения физики и математики уравнение Шредингера не имеет вывода; в математической физике, занимающейся решением этих уравнений. Под выводом понимается запись уравнения исходя из законов сохранения, общих и наводящих соображений и соображений симметричности.

Ниже мы рассмотрим вывод уравнения Шредингера для случая его операторной трактовки, смысл которой всплывёт на поверхность лишь в

конце раздела. Дополнительно мы приводим неоператорный, прямой вывод данного уравнения, который, по-видимому, и был исходным выводом, приведшем Шредингера к написанию данного уравнения.

Теория операторов (пропустить)

Классика (классическая механика, не релятивистский случай) – соотношение между кинетической энергией и импульсом:

$$T = \frac{mv^2}{2} = \frac{m^2 v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m},$$

или, в итоге:

$$T = \frac{p^2}{2m}. \quad (3.19)$$

Можно предположить, что такое же выражение будет справедливо для Ψ -функции в операторной форме. В случае отсутствия потенциальной энергии оператор полной энергии совпадёт с оператором кинетической энергии:

$$\frac{\hat{p}^2(\psi)}{2m} = \hat{E}(\psi). \quad (3.20)$$

Оператор квадрата импульса:

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2$$

Для каждой из координат имеем:

$$\hat{p}_x^2 = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = (-1)^2 \cdot (i)^2 \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} = 1 \cdot (-1) \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Тогда оператор квадрата импульса:

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

и искомое выражение примет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Это было решение в случае отсутствия потенциальных полей. Пусть теперь существуют потенциальные поля. Тогда:

$$\exists U \Rightarrow E = T + U,$$

$$T = E - U,$$

Связь $\frac{p^2}{2m} = E$ справедлива для кинетической энергии. То есть, если:

$$E = T$$

Подставим в исходное выражение вместо

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

выражение

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} - U\psi .$$

Тогда:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} - U\psi . \quad (3.21)$$

Имеем искомое уравнение в неоператорной форме:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (3.22)$$

Введём понятие ещё одного оператора – оператора Гамильтона. В классической (аналитической) механике Гамильтониан – выражение полной энергии через импульс и потенциальную энергию. В нашем случае для оператора полной энергии будем иметь *оператор Гамильтона*:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U . \quad (3.23)$$

Тогда нестационарное (общее) уравнение Шредингера выглядит, как *оператор полной энергии, выражается через импульс, приравненный к оператору полной энергии*:

$$\hat{H}\psi = \hat{E}\psi . \quad (3.24)$$

Здесь:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad \text{– оператор кинетической энергии,}$$

вырожденной через импульс

$$\hat{U} = U . \quad \text{– оператор потенциальной энергии}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U . \quad \text{– гамильтониан (оператор полной энергии,}$$

выраженный через импульс)

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad - \text{оператор полной энергии}$$

$$\hat{H}\psi = \hat{E}\psi \quad - \text{нестационарное (общее) уравнение Шредингера в операторном виде.}$$

Без теории операторов

Прямой, не операторный вывод. Вывод уравнения без использования теории операторов. Будем искать дифференциальное уравнение, одним из решений которого для случая отсутствия потенциальных полей будет волна де Бройля.

Вот уравнение волны:

$$\psi = \psi_0 e^{i\left(\frac{p_x x - E t}{\hbar}\right)}$$

Возьмём первую и вторую производные по x .

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \psi_0 e^{i\left(\frac{p_x x - E t}{\hbar}\right)} \cdot i \frac{p_x}{\hbar}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \psi_0 e^{i\left(\frac{p_x x - E t}{\hbar}\right)} \cdot \left(i \frac{p_x}{\hbar}\right)^2 = -\frac{p_x^2}{\hbar^2} \psi_0 e^{i\left(\frac{p_x x - E t}{\hbar}\right)} = -\frac{p_x^2}{\hbar^2} \psi$$

Так же по y и по z .

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\frac{p_y^2}{\hbar^2} \psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{p_z^2}{\hbar^2} \psi$$

Составим квадрат оператора набла (оператор Лапласа).

$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{\overbrace{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}^{p^2}}{\hbar^2} \psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi$$

Теперь возьмём производную по времени.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi_0 e^{i\left(\frac{p_x x - E t}{\hbar}\right)} \cdot (-i) \frac{E}{\hbar} = -i \frac{E}{\hbar} \psi$$

Поделим два предыдущих уравнения одно на другое.

$$\frac{\nabla^2 \psi}{\cancel{\partial \psi / \partial t}} = \frac{-\frac{p^2}{\hbar^2} \cancel{\psi}}{-i \frac{E}{\hbar} \cancel{\psi}}$$

Вспомним нерелятивистское соотношение между импульсом и кинетической энергией (*было выше*) и учтём, что в нашем случае вся энергия есть кинетическая.

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\hbar^2}{p^2} \nabla^2 \psi = -i \frac{\hbar}{E} \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ T = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p^2 = 2mE \\ E \equiv T \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = -i \frac{\hbar}{E} \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Получим соотношение

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Теперь, рассмотрим случай в условиях наличия потенциальных полей. Здесь кинетическая энергия будет равна разности полной и потенциальной.

$$E \neq T, E = T + U \Rightarrow T = E - U$$

Эту разность и подставим в соотношение между энергией и импульсом.

$$p^2 = 2m(E - U)$$

Преобразуем полученное выражение

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = -i\hbar \frac{E - U}{E} \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = -i\hbar \frac{E - U}{E} \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = -i\hbar \frac{\cancel{E}}{\cancel{E}} \frac{\partial \psi}{\partial t} + i\hbar \frac{U}{E} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \frac{-i\frac{E}{\hbar}\psi}{\cancel{E} \cancel{\hbar}}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = -i\hbar \frac{\cancel{E}}{\cancel{E}} \frac{\partial \psi}{\partial t} - i^2 \cancel{\hbar} \frac{U}{\cancel{E} \cancel{\hbar}} \psi$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + U\psi$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - U\psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Последнее выражение есть искомое нестационарное уравнение Шредингера.

3.4.2. Стационарное уравнение Шредингера

Без теории операторов

Можно доказать, что для стационарных процессов, т.е. когда потенциальная энергия системы не зависит явно от времени, решение данного уравнения может быть представлено в виде:

$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot \psi(t)$ т.е. как произведение пространственной и временной части.

Это можно показать, хотя бы, на примере волны де Бройля – решения уравнения Шредингера для случая стационарного движения частицы вне потенциальных полей (по постановке задачи при выводе уравнения).

Для волны де Бройля:

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z, t) &= \psi_0 e^{i\left(\frac{\bar{p} \cdot \bar{r}}{\hbar} - \frac{E}{\hbar} t\right)} = \psi_0 e^{i\frac{\bar{p} \cdot \bar{r}}{\hbar} - i\frac{E}{\hbar} t} = \\ &= \psi_0 e^{i\frac{\bar{p} \cdot \bar{r}}{\hbar}} \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar} t} = \psi(x, y, z) \psi(t) \end{aligned}$$

$$\psi(x, y, z) = e^{i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}}$$

$$\psi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Замечание. В общем случае в математической физике под стационарными уравнениями в частных производных понимаются (*по определению*) уравнения, не включающие в себя производную по времени и параметры которых явно не зависят от времени. Именно такие уравнения описывают все стационарные задачи в физике. В рамках математической физики существует теорема, доказывающая, что решения всех таких уравнений всегда могут быть представлены в виде произведения пространственной и временной части, т.е. произведения двух функций, одна из которых зависит только от координат, другая только от времени. В физике под стационарными задачами обычно понимаются задачи, где параметры (*в частности, потенциальная энергия, как здесь*) не зависят от времени. Отсутствие в уравнениях частной производной по времени получается здесь автоматически.

Подставим это выражение в нестационарное (*общее*) уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 (\psi(x, y, z) \cdot \psi(t)) + U \cdot (\psi(x, y, z) \cdot \psi(t)) = i\hbar \frac{\partial (\psi(x, y, z) \cdot \psi(t))}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) \cdot \psi(t) + U \cdot \psi(x, y, z) \cdot \psi(t) = i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} \psi(x, y, z)$$

На примере стационарного решения волны де Бройля можно показать, что множитель, стоящий в правой части перед $\psi(x, y, z)$, т.е. $i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t}$ будет равен значению полной энергии $E \cdot \psi(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = E \cdot \psi(t).$$

$$\psi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}{\partial t} = i\hbar e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \cdot (-i) \frac{E}{\hbar} = -i^2 \frac{\hbar}{\hbar} E \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = E \cdot \psi(t)$$

(это мы показывали, когда рассматривали оператор энергии)

Данное утверждение также можно доказать в общем виде (для произвольного стационарного решения) и скорее всего общий вид временной части не изменится. Вообще, можно доказать, что любое стационарное состояние для ψ -функции будет иметь вид:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}. \quad (3.25)$$

Вообще говоря, в нашем уравнении выражение $i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t}$ есть действие оператора энергии на стационарное состояние. А, как будет показано ниже, в этом случае действие оператора даст произведение собственного значения этого оператора на собственную волновую функцию:

$$E \cdot \psi(t) \cdot \psi(x, y, z).$$

Подставим получившееся выражение в исходное уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) \cancel{\psi(t)} + U \cdot \psi(x, y, z) \cancel{\psi(t)} = E \cancel{\psi(t)} \psi(x, y, z).$$

В итоге имеем **стационарное уравнение Шредингера**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) + U \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z). \quad (3.26)$$

Теория операторов ([пропустить](#))

Операторная форма представления стационарного уравнения Шредингера:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (3.27)$$

где

\hat{H} – как и прежде, *оператор Гамильтона* или *Гамильтониан*. Данная форма записи уравнения – есть постановка задачи на поиск собственных значений оператора полной энергии в гамильтоновой форме.

[\(вернуться к ссылке из раздела «Собственные значения операторов и собственные вектора»\)](#)

Ещё несколько форм представления для стационарного уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) - U\psi(x, y, z) \quad (3.28)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) = (E - U)\psi(x, y, z) \quad (3.29)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) - (E - U)\psi(x, y, z) = 0 \quad (3.30)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) + (E - U)\psi(x, y, z) = 0 \quad (3.31)$$

$$\nabla^2 \psi(x, y, z) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi(x, y, z) = 0 \quad (3.32)$$

Обращаем внимание, что последняя форма уравнения чаще всего будет использоваться при решении практических задач.

Замечание 1. Обратите внимание, что операторная форма записи стационарного уравнения Шредингера полностью эквивалентна записи постановки задачи на поиск собственных чисел и собственных векторов в линейной алгебре. См. курс линейной алгебры:

Матричное уравнение на поиск собственных чисел и собственных векторов выглядит следующим образом:

$$A\bar{a} = \lambda\bar{a}.$$

Если в координатном представлении новые значения вектора выражаются через старые, как

$$a_i'' = \sum_{j=1}^N A_{ij} a_j,$$

то наша задача найти такие координаты, чтобы соответствующее выражение имело вид

$$a_i'' = \lambda_i a_i.$$

Базис, в котором выполняется это условие, называется базисом из собственных векторов данного преобразования.

В матричном виде:

$$\begin{matrix} e_1 & e_2 & e_3 & \cdots & e_N \\ \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots & A_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{N1} & A_{N2} & A_{N3} & \cdots & A_{NN} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{pmatrix} & \Rightarrow & \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda_N \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ \dots \\ a'_N \end{pmatrix} \end{matrix}$$

Здесь $\{e_1, e_2, e_3, \dots, e_N\}$ – исходный базис, $\{e'_1, e'_2, e'_3, \dots, e'_N\}$ – собственный базис данного линейного оператора.

Мы видим, что переход от исходного базиса к базису из собственных векторов данного линейного оператора приводит к диагонализации матрицы (*приведению матрицы преобразования к диагональному виду*).

Одинаковый вид (*идентичная, эквивалентная форма записи...*) стационарного уравнения Шредингера и задачи на поиск собственных значений и собственных векторов линейного преобразования в линейной алгебре – это не просто совпадение. Мы уже говорили, что, в каком-то смысле, линейным операторам можно сопоставить матрицу, пусть даже бесконечномерную. Физический смысл операторной формы стационарного уравнения Шредингера – это *задача на поиск собственных значений оператора энергии для микрочастицы*. Ниже мы поговорим о том, что только такие значения оператора можно реально измерить прибором в ходе физического эксперимента.

Замечание 2. Обратите внимание, что строя уравнение Шредингера мы постоянно так или иначе оперировали к волне де Бройля. Существует и другой (*прямой*) вывод этого уравнения, как уравнения, решением которого для стационарного случая в отсутствии потенциальных полей будет именно волна де Бройля (см. «Общий курс физики» Сивухина). Стоит знать, что решением уравнения Шредингера (*в общем-то, того и другого, здесь без разницы*) для такого случая (*свободная частица вне потенциальных полей*) будет *волна де Бройля по построению*.

Замечание 3. Стоит отметить, что общее уравнение Шредингера не решается вообще. Точное решение стационарного уравнения Шредингера существует только для атома водорода и водородоподобных ионов. Все остальные решения получаются из него теми или иными приближёнными методами.

3.5. Принципы квантовой механики

3.5.1. Простейший подход и наводящие соображения

Без теории операторов

Здесь мы проведём рассмотрение основных понятий квантовой механики, таких как стационарные состояния (*прообраз чистых состояний*), собственные значения оператора энергии и соответствующие им собственные волновые функции, принцип суперпозиции, как следствий решения уравнения Шредингера и свойств волновой функции. Квантовая механика возникла в своё время из слияния «Волновой механики» Шредингера и «Матричной механики» Гейзенберга. Выяснилось, что решения тех задач, которые ставил перед собой и в частных случаях решал Шредингер лежат в области матричной теории Гейзенберга. Мы будем рассматривать решения уравнения Шредингера, но постоянно косится на теорию матриц. Мы будем искать аналогии полученных нами решений и ставящихся там задач. Подробно построение данной теории мы проведём уже в следующем разделе.

Особое значение в квантовой механике имеют стационарные состояния (*по крайней мере, пока мы будем так считать*). В узком смысле под стационарным состоянием понимается состояние, в котором энергия системы (*полная энергия системы*) не меняется со временем. В широком смысле стационарные состояния – это состояние, в котором неизменными остаются все наблюдаемые величины. Остановимся пока на рассмотрении данного понятия «*в узком смысле*». Расширяя его до понимания «*в широком смысле*», мы уже, скорее, перейдём к определению «*чистых состояний*».

Стационарное состояние, в некотором смысле, можно считать эквивалентом **равновесного состояния** в **термодинамике**. Вспомним, в термодинамике равновесным состоянием называется состояние, в котором все параметры состояния (такие, как температура, давление, объём, энтропия) существуют для термодинамической системы, то есть являются равными для всех её элементов. В противном случае мы не сможем говорить, скажем, о температуре системы, а лишь о среднем его значении для его элементов. Таким образом, и энергия, не имея постоянного определённого значения для всей квантово-механической системы, не существует для этой системы и, следовательно, не может быть измерена в ходе эксперимента.

Таким образом, будем считать, что (в рамках решаемого нами уравнения) только стационарные состояния могут быть реально обнаружены в эксперименте. Только решения стационарного уравнения Шредингера, в этом смысле, представляют для нас интерес.

Далее. Решая стационарное уравнение Шредингера, можно показать, что не для всех значений энергии E существуют эти решения. Эти решения существуют для бесконечного, но дискретного множества значений энергии E_n . Данная задача будет решена в следующем за разделом «Принципы квантовой механики» разделе: «Классические задачи на решение уравнения Шредингера» – «[Частица в одномерной, бесконечно глубокой потенциальной яме](#)». (В данном случае мы имеем в виду не свободную частицу, для неё решением уравнения Шредингера по-прежнему будет волна де Бройля. И, как мы покажем ниже, даже для частицы в потенциальном поле, но не связанного в тех или иных рамках решение тоже будет волной. Речь идёт, в частности о частице в потенциальной яме, как самой простой модели состояния электрона на орбитали атома) Эти значения энергии мы назовём **собственными значениями**, а соответствующие им волновые функции (соответствующие этим значениям решения стационарного уравнения Шредингера) – **собственными волновыми функциями**. Уже здесь обратите внимание на совпадение терминологии в нашей задаче и задаче на поиск собственных значений и собственных векторов линейного оператора в линейной алгебре.

Теперь обратим внимание на следующий факт – уравнение Шредингера (как общее, так и стационарное) является линейным и однородным относительно ψ -функции. Как следует из математической теоремы, для него справедлив принцип суперпозиции: если какие-то две функции являются решением данного уравнения, то их линейная комбинация тоже является решением данного уравнения:

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3 + \dots = \sum c_i\psi_i. \quad (3.33)$$

С физической точки зрения, утверждение звучит как «если некоторый набор волновых функций является возможными состояниями системы, то и их линейная комбинация тоже является возможным состоянием этой системы».

Обратим внимание на немаловажный факт. Стационарное уравнение Шредингера было получено нами, как частный случай *общего уравнения*, суженный на *круг стационарных задач*. Таким образом, любое решение стационарного уравнения автоматически является и решением общего уравнения! Принцип суперпозиции не применим для решений стационарного уравнения – каждое из конкретных уравнений с конкретным значением энергии E_n имеет только одно решение. Их линейная комбинация будет линейной комбинацией совершенно разных уравнений! Она не будет являться решением ни одного из них. Однако, все они будут решениями одного и того же общего уравнения и, следовательно, их линейная комбинация так же будет его решением. Далее следует утверждение, что полученный таким образом набор базовых состояний (*решений стационарного уравнения Шредингера*) образует полный базис в пространстве состояний. И, в итоге, любое состояние нашей квантово-механической системы может быть представлено, как линейная комбинация (*суперпозиция*) тех самых стационарных состояний.

Что же мы получили? Принцип суперпозиции позволяет нам представить произвольное состояние системы, как линейную комбинацию её стационарных состояний. Но все эти состояния (*за исключением базы разложения, тех состояний, что включены в эту линейную комбинацию*) являются стационарными и не могут быть экспериментально обнаружены. Что же мы получим в результате эксперимента? В случае любого нестационарного состояния с той или иной вероятностью в эксперименте нами будет обнаружено, что система находится в одном из стационарных состояний, из которых получено данное не стационарное – в одном из состояний, из которых мы строили линейную комбинацию. Причём, если конечная (*результат суперпозиции*) волновая функция нормирована (*для неё выполнено условие нормировки*), вероятности будут равны квадратам коэффициентов разложения:

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3 + \dots \Rightarrow |c_1|^2, |c_2|^2, |c_3|^2, \dots \quad - \quad \text{вероятности обнаружения системы (частицы) в соответствующих состояниях.}$$

Теория операторов ([пропустить](#))

Теперь вернёмся к ассоциациям. Заметим, что стационарное уравнение Шредингера в операторной формулировке

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

полностью эквивалентно постановке задачи на поиск собственных значений линейного оператора в линейной алгебре:

$$A\bar{a} = \lambda\bar{a} . \tag{3.34}$$

При этом найденные собственные вектора (*собственные волновые функции, собственные состояния*) образуют (*это доказывается в рамках соответствующего курса*) полный базис в пространстве, на котором действует данный оператор. И, если принять во внимание, что в эксперименте могут наблюдаться только базисные, собственные состояния (*почему – мы разберём в следующем пункте*), разложение произвольного вектора, произвольного состояния по собственному базису даст нам, как раз, разложение произвольного состояния по базису реально наблюдаемых состояний. Очевидно, что, вспомнив статистический смысл волновой функции и проведя пару математических преобразования, мы легко докажем, что именно квадраты коэффициентов разложения (*в случае нормировки конечной волновой функции*) дадут нам вероятность обнаружения системы (*частицы*) в том или ином состоянии.

Заметим ещё для доведения наших утверждений до математической точности, что теория операторов является расширением *линейных и Евклидовых (линейное пространство со скалярным произведением)* пространств на *Гильбертовы пространства*. Причём, по определению, *Гильбертовы* и *Евклидовы* пространства совпадают, за тем исключением, что для первых не требуется их конечномерности (под *Гильбертовыми пространствами* обычно понимаются *Евклидовы пространства с бесконечномерным базисом*). Для минимального понимания единственное добавим, что пространство интегрируемых функций так же является линейным пространством со скалярным произведением, где разложением вектора по координатам является его разложение в ряд Фурье, а базисными векторами – набор синусов и косинусов (*либо экспонент*) этого разложения (*пространство L_2*).

Без теории операторов

3.5.2. Собственные значения энергии и волновой функции

И так, *зафиксируем результат*. Не вдаваясь в теорию операторов, мы можем сделать следующие утверждения:

1. С точки зрения решения уравнения Шредингера нас будут интересовать только стационарные решения этого уравнения, поскольку только эти решения (*эти состояния квантовой системы*) могут быть реально обнаружены в эксперименте. Таким образом решать мы будем только *стационарное уравнение Шредингера*.
2. Из всех решений уравнения стационарного Шредингера нас будут интересовать только те решения, в которых волновая функция будет удовлетворять указанным выше свойствам – гладкость (*непрерывность её и её первой производной*), конечность, однозначность (*как комплекснозначной функции, они бывают многолиственными...*). Эти условия будем называть *стандартными условиями*.

3. Энергия E входит в стационарное уравнение Шредингера в качестве параметра. Из теории дифференциальных уравнений известно, что подобное уравнение будет иметь решение, удовлетворяющее стандартным условиям не при всех значениях параметра E , а лишь при некотором (счётном – дискретном, но бесконечном) их наборе. Эти значения энергии **называются собственными значениями энергии** (квантово-механической системы, частицы...).
4. Решения стационарного уравнения Шредингера (*волновые функции*), соответствующие собственным значениям энергии называются **собственными функциями**.

Здесь мы вкратце сформулировали понятие *собственных значений* и *собственных функций*, не прибегая к теории операторов. Дальнейшее развитие этой идеи и полное понимание данных терминов возможно только в рамках операторного подхода, что и будет сделано ниже.

Теория операторов ([пропустить](#))

3.5.3. Собственные значения оператора и собственные вектора

И так (*ещё раз, кратко*). Решение задачи на поиск собственных значений и собственных векторов приводит к диагонализации оператора. Его действие на вектор сводится к умножению координат этого вектора (*в базисе из собственных векторов*) на число (*собственное число данного собственного вектора*). В частности, действие i -ый базисный вектора сводится к умножению этого вектора на i -ое собственное число:

$$A\bar{e}_i = \lambda_i \bar{e}_i. \quad (3.35)$$

Здесь

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1N} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{N1} & \cdots & A_{NN} \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

– линейный оператор,

$$E_i = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}_{N} \quad (3.37)$$

– матрица-столбец со всеми нулями и единицей на i -ом месте,

λ_i – i -ое собственное число, \bar{e}_i – i -ый вектор собственного базиса.

Именно так записывается задача на поиск значений (*собственных чисел*) и собственных векторов в линейного оператора в линейной алгебре.

В базисе из собственных векторов действие любого оператора сводится к умножению базисного вектора на число. Теперь, если мы считаем, что только базисные вектора (*состояния*) являются реально наблюдаемыми (*в терминологии предыдущего пункта – стационарные состояния*), то действия оператора сведётся к умножению волновой функции на число. А оператор, напомним, это математическое выражение того преобразования, которое произойдёт с волновой функцией в случае экспериментального определения того или иного параметра нашей системы. И вспомним, так же, что «*измерение*» есть эксперимент по сравнению измеряемой величины с эталоном – во сколько раз она больше или меньше его.

Теперь скажите, пусть «*оператор*» – это операция дифференцирование, а исходная функция – x^2 . Результат действия оператора равен $2x$. Во сколько раз полученная функция больше или меньше исходной? *Ответа нет!* Но, пусть оператор – это операция умножения на число, скажем, число 2 . Тогда x^2 превращается в $2x^2$. Во сколько раз полученная функция больше исходной – *ровно в два раза!* Теперь представим себе, что эксперимент по измерению физической величины преобразует её волновую функцию в точности так (*в ходе эксперимента*), на листе бумаги её преобразует соответствующий оператор – оператор этой физической величины. А сам процесс измерения физической величины – импульса, проекции момента импульса, энергии сводится к сравнению, на сколько увеличилась или уменьшилась её волновая функция. В этом случае реально измерить физическую величину мы сможем только в собственных состояниях, то есть, когда для векторов (*состояний*) коллинеарных (*параллельных*) базисному собственному вектору и процесс действия оператора сводится к простому умножению функции (*вектора*) на число.

Собственные значения оператора в квантовой механике.

И так вывод – для того, чтобы оператор мог быть измерен, его действие должно сводиться к умножению исходной функции (*волновой функции*) на число.

Напомним:

общий вид оператора импульса:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

мы выбрали, рассматривая уравнение:

$$p_x \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi,$$

получаемое при дифференцировании волны де Бройля. Аналогично для оператора полной энергии имеет вид:

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

Наводящим на мысль было следующее уравнение:

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

И в том и в другом случае из уравнений видно, что действие оператора (*в том случае, когда мы в состоянии измерить данную физическую величину*) сводится к умножению волновой функции на конкретное число. Причём именно то, что и будет измерено нами в ходе эксперимента.

Это очень приблизительные наводящие соображения. По существу, не имеющие реального отношения к «честной физике» и «честной математике». Скорее Ассоциативный ряд...

В любом случае, умножив волновую функцию на число, её придётся перенормировать, чтобы выполнилось условие нормировки. Эффект исчезнет. ☹. Но сам факт умножения на число, которое мы можем измерить, ассоциативное представление можно взять за основу.

Если быть более точным, речь идее о следующем:

Вспомним одно из свойств плотности вероятности (*мы рассматривали его в рамках «теории макросистем»*) – возможность рассчитать среднее значение некоторой величины или функции (*этим методом мы пересчитывали потом из распределения Максвелла среднеарифметическую и среднеквадратичную скорость молекул идеального газа*):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) f(x) dx = \langle \varphi(x) \rangle$$

При этом плотность вероятности может зависеть не от одного, а от нескольких аргументов. Причём, среднее мы будем считать только по объёму и эта величина будет зависеть от времени:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x, y, z, t) f(x, y, z, t) dV = \langle \varphi(V) \rangle(t)$$

Теперь вернёмся к операторам и Ψ -функции. Пусть действие оператора на Ψ -функцию даёт нам другую функцию \tilde{Q} :

$$\hat{Q}\psi(x, y, z, t) = \tilde{Q}(x, y, z, t).$$

Но это действие (функцию \tilde{Q}) всегда можно представить, как произведение всё той же функции Q на ту же Ψ -функцию:

$$\hat{Q}\psi(x, y, z, t) = Q(x, y, z, t) \cdot \psi(x, y, z, t)$$

Ну, хотя бы, следующим образом:

$$Q(x, y, z, t) = \frac{1}{\psi(x, y, z, t)} \cdot \tilde{Q}(x, y, z, t) = \frac{1}{\psi(x, y, z, t)} \cdot \hat{Q}\psi(x, y, z, t)$$

Теперь вспомним физический смысл Ψ -функции – квадрат её модуля есть плотность вероятности обнаружения частицы в той или иной точке пространства:

$$\bar{\psi}(x, y, z, t)\psi(x, y, z, t) = f(x, y, z, t)$$

Тогда приведённый ниже интеграл будет иметь смысл среднего по объёму значения этой самой функции Q :

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x, y, z, t) \hat{Q}(x, y, z, t) \psi(x, y, z, t) dV = \\ & \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x, y, z, t) Q(x, y, z, t) \psi(x, y, z, t) dV = \\ & \int_{-\infty}^{+\infty} Q(x, y, z, t) \underbrace{\bar{\psi}(x, y, z, t) \psi(x, y, z, t)}_{f(x, y, z, t)} dV = \\ & = \langle Q(V) \rangle(t). \end{aligned}$$

Скажем, если оператор \hat{Q} – оператор энергии, то среднее по объёму значение энергии. Но волновая функция описывает квантово-механическую систему, как единое ценное. Тогда вспомним, когда у системы существует тот или иной параметр состояния – когда он имеет одно определённое значение для всех элементов системы. В данном случае эта величина – не что иное, как средняя температура в комнате с горячей кастрюлей супа на столе и открытым холодильником. Ну или «средняя по больнице температура» (половина в морге, у половины горячка). Таким образом, в этом случае квантово-механическая система не будет иметь определённого значения данной величины.

Когда же искомая величина будет-таки иметь значение? Пусть действие оператора \hat{Q} на Ψ -функцию есть решение задачи на поиск собственных значений этого оператора. Тогда это значение и будет тем самым значением данной величины (в общем случае, может быть, даже зависящим от времени):

$$\begin{aligned} & \hat{Q}\psi(x, y, z, t) = q(t) \cdot \psi(x, y, z, t) \Rightarrow \\ & \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x, y, z, t) \hat{Q}(x, y, z, t) \psi(x, y, z, t) dV = \\ & \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x, y, z, t) q(t) \psi(x, y, z, t) dV = \end{aligned}$$

$$q(t) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x, y, z, t) \psi(x, y, z, t) dV}_1 = q(t).$$

Во всех же остальных случаях (всех остальных состояниях) данная физическая величина не будет иметь определённого значения. Однако, пользуясь свойствами пространства состояний (как *гильбертова пространства*), мы всегда можем представить данное состояние, как суперпозицию состояний, в которых данная величина имеет определённое значение. То есть, как суперпозицию «чистых состояний» – о них чуть дальше.

Принципиально наблюдаемыми являются только собственные значения оператора и наблюдаются они только в собственных состояниях. В этом случае постановка задачи на поиск собственных значений оператора – есть постановка задачи на поиск *измеримых значений оператора*. Для того, чтобы понять, какие именно значения той или иной физической величины будут реально проявляться (*наблюдаться*) в эксперименте, надо найти соответствующей ей оператор, записать уравнение, соответствующее решению задачи на поиск собственных значений этого оператора. *Спектр оператора* – то есть, набор собственных значений этого оператора и соответствующие им собственные функции и будут набором наблюдаемых значений данной физической величины и набором состояний системы, в которых эти значения будут наблюдаться.

В контексте сказанного мы можем теперь заявить, что рассмотренные в предыдущем разделе *собственные значения энергии* являются не чем иным, как *собственными значениями оператора энергии* (см. [операторный смысл стационарного уравнения Шредингера](#)). Соответствующие им *собственные функции* будут не чем иным, как *собственными функциями оператора энергии*.

3.5.4. «Наблюдаемые» и «чистые состояния»

Изучая данный вопрос «*по первому разу*», и ещё не введя понятие операторов и операторной трактовки квантовой механики, мы говорим, что реально обнаруженными могут быть только *стационарные состояния* – то есть *состояния с постоянным, определённым значением полной энергии системы*. Это логично. Только потом мы приходим к выводу, что подобным свойством может обладать любая измеряемая величина. Как мы показали в предыдущем пункте, некая физическая величина может быть измерена, только если состояние в котором находится сейчас квантово-механическая система есть собственное состояние её оператора. В этом случае результат измерений будет равен собственному значению данного оператора, соответствующему данному собственному состоянию. Но частица, квантовая система, может находиться в состоянии, в котором данный оператор не имеет конкретного числового значения. Или, вообще, в этом состоянии нельзя изменить значение ни одной физической величины. И тогда данное состояние принципиально не наблюдается.

И так. Не все параметры квантово-механической системы можно реально наблюдать в эксперименте. И не во всех состояниях этой системы можно наблюдать те или иные её параметры. **«наблюдаемая» (это существительное)** – это физическая величина, которую можно наблюдать для данной квантово-механической системы (данного кванта, частицы) в данном состоянии. Не все физические величины вообще являются наблюдаемыми:

пример 1: фаза волновой функции не является **наблюдаемой** и не может быть определена ни в одном эксперименте;

пример 2: момент импульса не является наблюдаемой, наблюдаемой является абсолютная величина (точнее, скалярный квадрат) вектора момента импульса и одна из его проекций.

Некоторые параметры не могут наблюдаться вместе, и измерение одной из них приводит к тому, что вторая перестаёт быть наблюдаемой:

пример: принцип неопределенности Гейзенберга

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$$

Если в каком-то эксперименте «наблюдаемой» является координата, импульс не является «наблюдаемым» в данном эксперименте.

Теперь о наблюдаемых состояниях. Разбираясь с вопросом о стационарных и не стационарных состояниях, мы уже выяснили, что не все состояния могут проявляться в эксперименте. **Чистым** называется состояние, которое **реально может быть обнаружено в эксперименте**. Любой эксперимент есть эксперимент по измерению какого-либо параметра исследуемой системы (ну, хотя бы координаты или импульса частицы). Таким образом, чистое состояние должно быть собственным состоянием хотя бы одного оператора.

В итоге, наш поиск **собственных состояний оператора** по факту стал поиском **чистых состояний** нашей квантово-механической системы.

3.5.5. Свойство суперпозиции волновой функции

Без теории операторов

И так ещё раз о свойстве суперпозиции. *Суперпозиция двух состояний квантово-механической системы есть состояние этой системы (если для какой-либо квантовой механической системы разрешены состояния, описываемые волновыми функциями Ψ_1, Ψ_2 и т.д., то их линейная комбинация – есть также возможное состояние системы).*

Пусть существуют:

$$\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots \quad (3.38)$$

– волновые функции, разрешенные для данной системы (являются решениями уравнения Шредингера, возможными состояниями).

Тогда состояние, описываемое волновой функцией:

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + c_3\Psi_3 + \dots \quad (3.39)$$

– также возможное (*разрешенное, допустимое*) состояние.

Исходно данное утверждение следует из свойства линейности решений линейного дифференциального уравнения, коим является уравнение Шредингера (*в данном случае речь идёт об общем, нестационарном уравнении*): если какие-либо функции являются решением такого уравнения, их линейная комбинация всегда будет решением этого уравнения.

Теория операторов (пропустить)

Теперь посмотрим на это свойство с операторной точки зрения. Теперь это свойство есть не следствие особого свойства решения уравнения Шредингера, а свойство Гильбертова пространства состояний для данной квантово-механической системы. Причём, нас с вами интересуют не любые разложения произвольного состояния в линейную комбинацию других состояний, а разложение его по базису собственных состояний того или иного оператора, то есть по базису *чистых состояний*.

При этом, если данная волновая функция нормирована, то квадраты коэффициентов в этой линейной комбинации есть не что иное, как вероятности обнаружения того или иного чистого состояния (*математическое доказательство этого утверждения мы оставим в стороне*).

Пример: атом водорода, переход электрона с орбитали на орбиталь. Пусть электрон переходит из состояния $1s$ в $2p$ в атоме водорода. Как происходит этот переход и можем ли мы обнаружить его в это время? Состояния, в которых он находится во время этого процесса, не являются стационарными и не являются чистыми. Они могут быть описаны, как линейная комбинация двух вышеприведенных состояний с разными весовыми коэффициентами. Таким образом, в процессе этого движения ниш электрон сначала с вероятностью, скажем, 90% будет обнаружен в $1s$, и с вероятностью 10% в $2p$. Затем с вероятностями 80% и 20%,... и, наконец, 10% и 90%. А само переходное состояние так и не будет обнаружено ни в одном из экспериментов.

3.6. Классические задачи на решение уравнения Шредингера

Без теории операторов

3.6.1. Частица в одномерной, бесконечно глубокой потенциальной яме

Пусть частица находится в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме. Не следует понимать это утверждение, как «*наличие очень прочных стенок справа и слева*». Просто, для попадания в область пространства справа и слева от центральной зоны, частица должна обладать бесконечно большой энергией. Ну, скажем, если рассматриваемая частица – электрон, то пусть на границах зоны у нас скачком возникает бесконечно

большой электрический потенциал, выталкивающий частицу обратно (в центр).

Оказывается, в этом случае, для энергии допустимы отнюдь не все возможные значения, если требовать, чтобы решение обладало свойствами, которыми необходимо должна обладать волновая функция. В итоге, мы в первый раз «честно» перейдем к понятию собственных значений и собственных волновых функций.

[Перейти в выводы.](#) («визит» из раздела «Принципы квантовой механики» – «Простейший подход и наводящие соображения»☺)

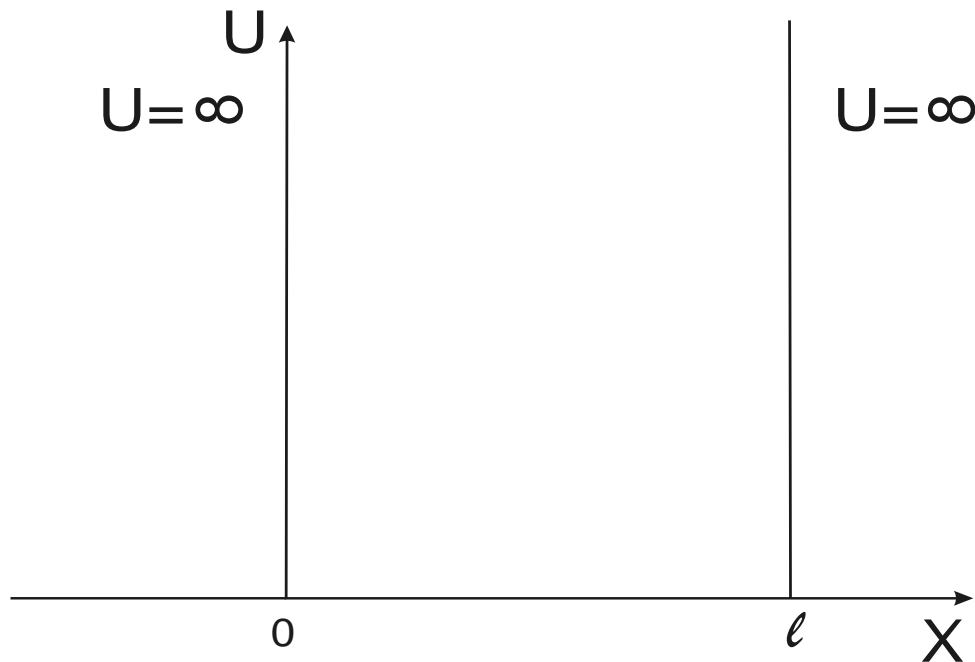


Рисунок 3.6
Одномерная потенциальная яма

Выберем начало координат в точке левой границы ямы (*в нашем праве выбрать начало отсчёта оси X в любой точке, где захотим*). Выберем за 0 потенциальной энергии потенциальную энергию на дне ямы (потенциальная энергия всегда известна с точностью до аддитивной постоянной – мы всегда можем прибавить к ней константу или отнять, не внося изменения в условия задачи; когда Вы стоите на краю обрыва, ещё не известно, где 0 высоты – у Вас под ногами или где-то далеко внизу...).

Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера в следующей формулировке (*мы приводили её вывод из основной формы*):

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + (E - U) \psi = 0$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (E - U) \psi = 0$$

Поскольку все остальные переменные и производные по ним, кроме x отсутствуют, можем спокойно заменить частную производную на обыкновенную. В итоге имеем *обыкновенное дифференциальное уравнение*:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - U)\psi = 0$$

Потенциальная энергия в зоне, где мы ищем решение, равна нулю.

$$x \in [0; l] \Rightarrow U = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + E\psi = 0$$

Теперь приведём уравнение к стандартному виду:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0$$

Решим это уравнение.

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$$

Характеристическое уравнение:

$$\lambda^2 + k^2 = 0$$

$$\lambda = \pm\sqrt{-k^2}$$

$$\lambda = \pm ik$$

$$\psi' = \psi_{01}e^{+ikx} + \psi_{02}e^{-ikx}$$

В теории интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений доказывается, что, если корнями характеристического уравнения является пара чисто мнимых, значения, причём эти значения являются *комплексно-сопряжёнными числами*, то им в реальном сечении (если мы выделяем решения, принадлежащие \mathbb{R} из множества \mathbb{C}) соответствует линейная комбинация косинуса и синуса от того же аргумента:

$$\psi = \psi_{01} \cos(kx) + \psi_{02} \sin(kx)$$

Далее, используя некоторые преобразования, приведённые мелким шрифтом, мы переходим от решения в виде косинуса и синуса с неизвестными амплитудами к решению с одной тригонометрической функцией (в данном случае, синусом) с неизвестными амплитудой и сдвигом фаз. Обращаем Ваше внимание, абсолютное значение конечных констант и их связь с начальными нас абсолютно не волнует – их мы будем искать из граничных условий в том виде, в каком они будут присутствовать на момент решения этой задачи.

Будем использовать это соотношение:

$$a \cos(\omega t) + b \sin(\omega t) = A \cos(\omega t + \varphi_0) = A \sin(\omega t + \alpha_0)$$

$$A = \sqrt{a^2 + b^2}, \quad \varphi_0 = -\operatorname{arctg}\left(\frac{b}{a}\right), \quad \alpha_0 = \varphi_0 + \frac{\pi}{2}.$$

Получим решение в виде:

$$\psi = \psi_0 \sin(kx + \alpha).$$

Теперь перейдём к граничным условиям. Точнее, будем использовать свойство непрерывности волновой функции на. Поскольку в область в бесконечно большой потенциальной энергией (которой у неё нет) частица не сможет попасть ни при каких условиях (даже с учётом «чудес» квантовой механики, на подобии «туннельного эффекта»), амплитуда вероятности там будет равна 0.

$$\psi(0) = \psi(l) = 0$$

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow \psi_0 \sin(k \cdot 0 + \alpha) = 0 \Rightarrow \psi_0 \sin(\alpha) = 0 \Rightarrow \alpha = 0$$

$$\psi(l) = 0 \Rightarrow \psi_0 \sin(k \cdot l) = 0 \Rightarrow kl = 0 + \pi n, \quad n \in \mathbb{N}$$

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \cdot l = \pi n \Rightarrow \frac{2m}{\hbar^2} E l^2 = \pi^2 n^2 \Rightarrow E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ml^2}$$

Результатом наших действий явился вывод, что не при всех значениях энергии существует решение уравнения, когда искомая функция удовлетворяет предъявленным выше условиям (непрерывность, гладкость, конечность, однозначность). Полученные значения энергии, индексированные натуральным числом n (в дальнейшем – главным квантовым числом), на самом деле и будут стационарными значениями энергии, то есть теми значениями, при которых существует стационарное решение уравнения Шредингера. С другой стороны, используя операторный подход, мы можем сказать, что они будут составлять спектр оператора энергии для этой задачи – то есть набор собственных значений оператора энергии, при которых сам оператор превращается в число и является, следовательно, измераемым.

Ниже покажем, что шаг между энергетическими уровнями будет (для этой задачи) пропорционален номеру уровня (главному квантовому числу).

$$\begin{aligned} \Delta E_n = E_{n+1} - E_n &= \frac{\pi^2 \hbar^2 (n+1)^2}{2ml^2} - \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ml^2} = \\ &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \left(\cancel{n^2} + 2n + 1 - \cancel{n^2} \right) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n + 1) \approx \end{aligned}$$

$$\approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \lambda n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{ml^2} n. \quad (3.40)$$

Для нахождения самих собственных значений (*точнее, нам осталось найти амплитуду волновой функции*) используем условие нормировки. При этом аргумент под синусом удобно заменить на то, чему он соответствует, исходя из условий непрерывности на верхней границе диапазона (*то, чему мы его приравняли, исходя из этих условий*):

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} l = \pi n \Rightarrow k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{\pi n}{l}$$

$$\psi = \psi_0 \sin \frac{\pi n x}{l}$$

Само условие нормировки:

$$\int_0^l \psi_0^2 \sin^2 \frac{\pi n x}{l} dx = 1$$

$$\int_0^l \psi_0^2 \sin^2 \frac{\pi n x}{l} dx = \psi_0^2 \int_0^l \sin^2 \frac{\pi n x}{l} dx =$$

$$\sin^2 \alpha = \frac{1 - \cos 2\alpha}{2}$$

$$= \psi_0^2 \int_0^l \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos \frac{2\pi n x}{l} \right) dx = \psi_0^2 \left(\frac{1}{2} x \Big|_0^l - \frac{l}{4\pi n} \sin \frac{2\pi n x}{l} \Big|_0^l \right) =$$

$$= \psi_0^2 \left(\frac{1}{2} l - \frac{1}{2} \cdot 0 - \frac{l}{4\pi n} \left(\sin \frac{2\pi n \lambda}{\lambda} - \sin \frac{2\pi n \cdot 0}{l} \right) \right) =$$

$$= \psi_0^2 \left(\frac{1}{2} l - \frac{l}{4\pi n} \left(\overbrace{\sin 2\pi n}^0 - \overbrace{\sin 0}^0 \right) \right) = \frac{1}{2} l \cdot \psi_0^2.$$

$$\frac{1}{2} l \cdot \psi_0^2 = 1 \Rightarrow \psi_0 = \sqrt{\frac{2}{l}}$$

В итоге имеем набор собственных значений энергии и соответствующих им собственных волновых функций для данной задачи:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n x}{l}, \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ml^2}. \quad (3.41)$$

Также можно отметить, что сама волновая функция и квадрат её амплитуды (плотность вероятности обнаружения частицы) будут иметь следующий вид:

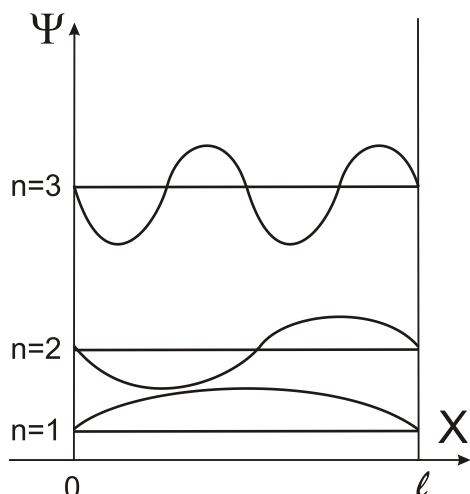


Рисунок 3.7
Волновая функция частицы в потенциальной яме

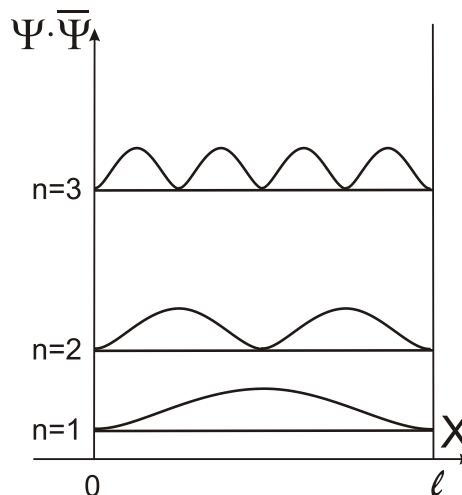


Рисунок 3.8
Плотность вероятности нахождения частицы

Перейти к [принципу неопределённости Гейзенберга](#) при первом прочтении. Хотя следующие два параграфа (до «принципа неопределённости») можно читать и подряд, не пропуская при первом прочтении. Они не содержат ничего, кроме доступной для Вашего осознания математики ☺.

[\(Вернуться к ссылке из раздела «Принципы квантовой механики» – «Простейший подход и наводящие соображения»\)](#)

3.6.2. Прохождение частицы через потенциальный барьер (одномерный, прямоугольный, высокий)

Пусть частица движется в свободном пространстве и на её пути встречается потенциальный барьер. (Скажем, это электрон, проходящий через фокусирующий анод электронно-лучевой трубки. Чтобы двигаться дальше кинетическая энергия электрона должна быть больше, чем произведение заряда на разность потенциалов между катодом и фокусирующим анодом) Пусть у частицы не достаточно энергии для проникновения в область барьера. В классическом случае частица отразилась бы от барьера, но квантовая механика даёт частице возможность поникнуть за барьер.

Как и в предыдущем разделе, примем за начало координат начало барьера, а потенциальную энергию вне барьера за ноль.

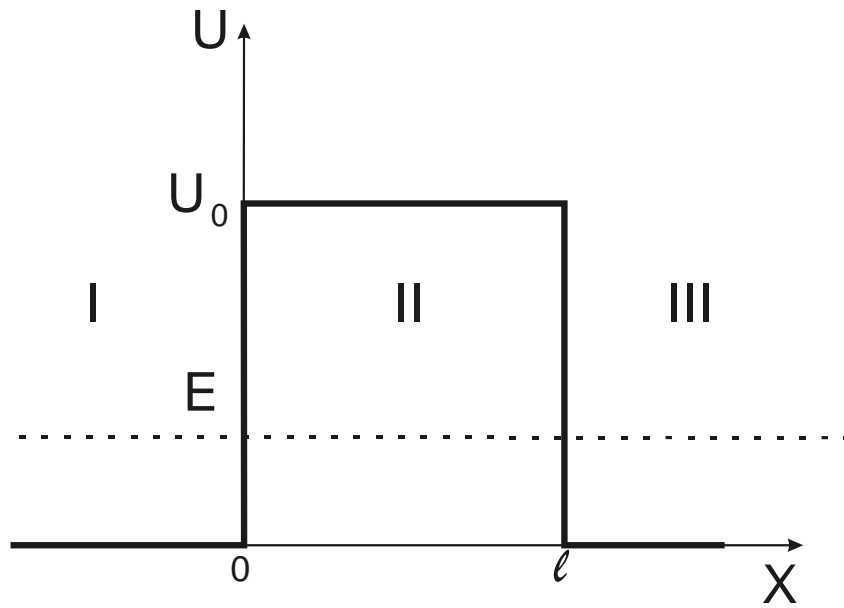


Рисунок 3.9

Прохождение частицы через высокий потенциальный барьер

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + (E - U) \psi = 0$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (E - U) \psi = 0$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + (E - U) \psi = 0$$

Решения будут различны (в силу отличия значения потенциальных энергий) для зон **I**, **II** и зоны **III**.

Зоны **I** и **III**:

$$U = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + E \psi = 0,$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0,$$

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \Rightarrow \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \alpha^2 \psi = 0,$$

$$\lambda^2 + \alpha^2 = 0,$$

$$\lambda = \pm \sqrt{-\alpha^2},$$

$$\lambda = \pm i\alpha$$

Характеристическое уравнение, как и в предыдущей задаче имеет чисто мнимые корни. Это значит, что ψ -функция будет иметь физический смысл волны.

$$\psi_1 = A_1 e^{+i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x},$$

$$\psi_3 = A_3 e^{+i\alpha x} + B_3 e^{-i\alpha x}.$$

Зона II:

$$U = U_0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - U_0)\psi = 0,$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)\psi = 0,$$

$$\beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}, \quad U_0 > E, \quad \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) = -\beta^2 \Rightarrow$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \beta^2\psi = 0,$$

$$\lambda^2 - \beta^2 = 0,$$

$$\lambda = \pm \beta$$

В отличие от всех предыдущих случаев, здесь корни характеристического уравнения действительные. А значит, что экспоненты в решении будут иметь не мнимый, а действительный аргумент. Значит они уже не представимы в нашем, действительном сечении, как синус и косинус. Их физический смысл это уже не волна, а *глубина проникновения* частицы за барьер.

$$\psi_2 = A_2 e^{+\beta x} + B_2 e^{-\beta x}$$

Поскольку первое слагаемое в найденных нами решениях ($A_1 e^{+i\alpha x}$) соответствует волне, распространяющейся вперёд, а второе ($B_1 e^{-i\alpha x}$) – волне, распространяющейся назад, то есть, отражённой от препятствия, коэффициент B_3 будет равен нулю ($B_3 e^{-\beta x}, B_3 = 0$), так как за преградой отражённой волны нет:

$$B_3 = 0 \Rightarrow \psi_3 = A_3 e^{i\alpha x}$$

Используем свойства волновой функции – непрерывности её и её первой производной (*гладкости*) на границах барьера (*границы зон I-II и II-III*). Тогда имеем:

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \psi_2(l) = \psi_3(l) \\ \frac{d\psi_1}{dx}(0) = \frac{d\psi_2}{dx}(0) \Rightarrow \\ \frac{d\psi_2}{dx}(l) = \frac{d\psi_3}{dx}(l) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ A_2 e^{\beta l} + B_2 e^{-\beta l} = A_3 e^{i\alpha l} \\ i\alpha A_1 - i\alpha B_1 = \beta A_2 - \beta B_2 \\ \beta A_2 e^{\beta l} - \beta B_2 e^{-\beta l} = i\alpha A_3 e^{i\alpha l} \end{cases} \quad \div A_1$$

Введём новые коэффициенты:

$$b_1 = \frac{B_1}{A_1}, \quad a_2 = \frac{A_2}{A_1}, \quad b_2 = \frac{B_2}{A_1}, \quad a_3 = \frac{A_3}{A_1}$$

$$n = \frac{\beta}{\alpha} = \sqrt{\frac{U_0 - E}{E}}$$

$$\begin{cases} 1 + b_1 = a_2 + b_2 & (1) \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_2 e^{\beta l} + b_2 e^{-\beta l} = a_3 e^{i\alpha l} & (2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} i - i b_1 = n a_2 - n b_2 & (3) \end{cases}$$

$$\begin{cases} n a_2 e^{\beta l} - n b_2 e^{-\beta l} = i a_3 e^{i\alpha l} & (4) \end{cases}$$

(Здесь мы ввели свою, внутреннюю нумерацию уравнений только для этого вывода)

Основной задачей наших построений будет определение вероятности проникновения частицы за барьер и вероятности её отражения от барьера:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = |b_1|^2 \quad - \quad \text{коэффициент отражения (квадрат амплитуды отражённой волны к квадрату амплитуды падающей волны).}$$

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = |a_3|^2$$
 – коэффициент прохождения (квадрат амплитуды прошедшей волны к квадрату амплитуды падающей волны).

$$R + D = 1.$$

⇒ **необходимый минимум...**

(Пропустить математические преобразования)

Попытаемся определить значение коэффициента прохождения:

$$(1) \begin{cases} 1 + b_1 = a_2 + b_2 \\ i - ib_1 = na_2 - nb_2 \end{cases} \cdot i \quad (+)$$

$$(5) \quad 2i = (n+i)a_2 - (n-i)b_2$$

$$(1) \begin{cases} a_2 e^{\beta l} + b_2 e^{-\beta l} = a_3 e^{i\alpha l} \\ na_2 e^{\beta l} + nb_2 e^{-\beta l} = ia_3 e^{i\alpha l} \end{cases} \cdot i \quad (+)$$

$$(6) \quad (n-i)a_2 e^{\beta l} - (n+i)b_2 e^{-\beta l} = 0$$

$$(5) \Rightarrow 2i - (n+i)a_2 = -(n-i)b_2 \quad \left. \begin{array}{l} \\ (6) \Rightarrow (n-i)a_2 e^{\beta l} = (n+i)b_2 e^{-\beta l} \end{array} \right\} \div$$

$$\frac{2i}{(n-i)a_2} e^{-\beta l} - \frac{(n+i)}{(n-i)} e^{-\beta l} = -\frac{(n-i)}{(n+i)} e^{\beta l}$$

$$\frac{2i}{(n-i)a_2} e^{-\beta l} = \frac{(n+i)}{(n-i)} e^{-\beta l} - \frac{(n-i)}{(n+i)} e^{\beta l}$$

$$\frac{2i}{a_2} e^{-\beta l} = (n+i) e^{-\beta l} - \frac{(n-i)^2}{(n+i)} e^{\beta l}$$

$$\frac{a_2}{2i} e^{\beta l} = \frac{(n+i)}{(n+i)^2 e^{-\beta l} - (n-i)^2 e^{\beta l}}$$

$$a_2 = \frac{2i(n+i)e^{-\beta l}}{(n+i)^2 e^{-\beta l} - (n-i)^2 e^{\beta l}}$$

$$\left. \begin{aligned} (5) &\Rightarrow (n+i)a_2 = 2i + (n-i)b_2 \\ (6) &\Rightarrow (n-i)a_2 e^{\beta l} = (n+i)b_2 e^{-\beta l} \end{aligned} \right\} \div$$

$$\frac{(n+i)}{(n-i)} e^{-\beta l} = \frac{2i}{(n+i)b_2} e^{\beta l} + \frac{(n-i)}{(n+i)} e^{\beta l}$$

$$\frac{2i}{(n+i)b_2} e^{\beta l} = \frac{(n+i)}{(n-i)} e^{-\beta l} - \frac{(n-i)}{(n+i)} e^{\beta l}$$

$$\frac{2i}{b_2} e^{\beta l} = \frac{(n+i)^2}{(n-i)} e^{-\beta l} - \frac{(n-i)(n+i)}{(n+i)} e^{\beta l}$$

$$\frac{b_2}{2i} e^{-\beta l} = \frac{(n-i)}{(n+i)^2 e^{-\beta l} - (n-i)^2 e^{\beta l}}$$

$$b_2 = \frac{2i(n-i)e^{\beta l}}{(n+i)^2 e^{-\beta l} - (n-i)^2 e^{\beta l}}$$

$$(2) \Rightarrow \frac{2i(n+i) \cancel{e^{-\beta l}}}{(n+i)^2 e^{-\beta l} - (n-i)^2 e^{\beta l}} \cancel{e^{\beta l}} +$$

$$+ \frac{2i(n-i) \cancel{e^{\beta l}}}{(n+i)^2 e^{-\beta l} + (n-i)^2 e^{\beta l}} \cancel{e^{-\beta l}} = a_3 e^{i\alpha l}$$

$$a_3 = \frac{2i(n+i) + 2i(n-i)}{(n+i)^2 e^{-\beta l} - (n-i)^2 e^{\beta l}} e^{-i\alpha l}$$

$$a_3 = \frac{4in}{(n+i)^2 e^{-\beta l} - (n-i)^2 e^{\beta l}} e^{-i\alpha l}$$

$$a_3 = \frac{4in}{\underbrace{(n+i)^2 e^{-\beta l} - (n-i)^2 e^{\beta l}}_{\rightarrow 0}} e^{-i\alpha l} \approx -\frac{4ine^{-i\alpha l}}{(n-i)^2} e^{-\beta l} \quad (3.42)$$

И так. Искомое значение коэффициента прохождения в выражении через фундаментальные константы и параметры нашей системы:

$$D = |a_3|^2 \approx \frac{16n^2}{\underbrace{(n^2 + 1)^2}_{\rightarrow 1}} e^{-2\beta l} \approx e^{-2\beta l} = e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}l} \quad (3.43)$$

Теперь проанализируем полученные результаты. Решение в I и III областях, как мы видим, как и прежде является *волной*. Однако решение для области II уже не будет иметь смысл волны – это экспонента не с мнимым, как в случае волны, а с действительным показателем. Для области II Ψ -функция будет иметь смысл вероятности проникновения на определённую глубину внутрь барьера.

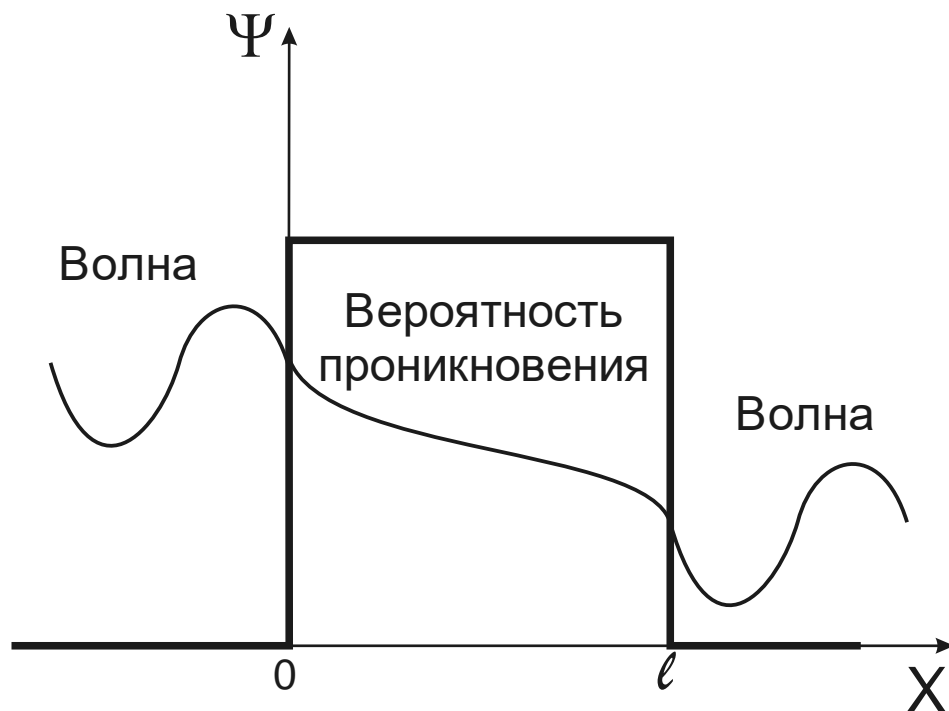


Рисунок 3.10

Вероятность проникновения частицы за барьер

С точки зрения осмысления полученных результатов можно сказать, что в нашем примере, скажем следующее. Электрон пытается пройти через область, где у него должна быть более высокая потенциальная энергия, чем вся, имеющаяся у него на данный момент (*он обладает кинетической энергией, полученной, после разгона электронно-лучевой пушкой*). С классической точки зрения он не сможет сделать этого ни в каком случае и, просто, будет вытолкнут из поля. В точки квантовой механике это всё же

возможно. Он может «просочиться за барьер», не потеряв и сколько энергии, и продолжить движение дальше. Это явление называется **туннельным эффектом**. Таким образом могут протекать химические реакции в том случае, если энергии атомов и молекул не хватает для преодоления энергетического барьера (*энергия активации*). Это становится особенно заметно при температурах, близких к абсолютному нулю, когда прекращаются вообще все процессы. Сюда же относится контактная разность (*холодная эмиссия электронов в металле*) потенциалов, α -распад, спонтанное деление ядра и т.д.

3.6.3. Гармонический осциллятор

Рассмотрим уже уравнение Шредингера в уже привычной нам форме:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0.$$

И пусть рассматриваемая нами частица находится в поле квазиупругих сил (*сил, описываемых законом, аналогичным закону Гука: $F = -kx$*). Напомним, в этом случае частица будет способна совершать гармонические колебания. И в этом случае такая система будет называться **гармоническим осциллятором**.

Тогда потенциальная энергия системы будет задаваться уравнением:

$$U = \frac{kx^2}{2}.$$

Зная соотношение между циклической частотой и коэффициентом жёсткости:

$$\omega^2 = \frac{k}{m} \Rightarrow k = m\omega^2,$$

Можно выразить эту энергию через частоту колебаний и массу частицы:

$$\left. \begin{array}{l} U = \frac{kx^2}{2} \\ k = m\omega^2 \end{array} \right\} \Rightarrow U = \frac{(m\omega^2)x^2}{2} = \frac{m\omega^2}{2} x^2.$$

Напомним:

$$\left. \begin{array}{l} \ddot{x} + \omega^2 x = 0 \text{ (ур - е гармонических колебаний)} \\ \ddot{x} + \frac{k}{m} x = 0 \text{ (II закон Ньютона)} \end{array} \right\} \Rightarrow \omega^2 = \frac{k}{m}.$$

Окончательно имеем:

$$U = \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (3.44)$$

Подставим полученное выражение в уравнение Шредингера:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi = 0. \quad (3.45)$$

Мы не будем приводить решение этого уравнения. Скажем лишь, что получаемый в результате его спектр энергий будет иметь вид:

$$E_\nu = \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad (3.46)$$

где ν – колебательное квантовое число,

ω – собственная частота колебаний осциллятора.

Также можно показать, что в данном случае будет иметь место правило отбора:

$$\Delta \nu = \pm 1. \quad (3.47)$$

Колебательное квантовое число может изменяться только на плюс-минус единицу!

Также отметим, что спектр энергий гармонического осциллятора будет *равномерный (эквидистансный)*:

$$\begin{aligned} \Delta E_\nu &= E_{\nu+1} - E_\nu = \left(\left(\nu + \frac{1}{2} + 1 \right) - \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \right) \hbar \omega = \\ &= \left(\cancel{\nu} + \cancel{\frac{1}{2}} + 1 - \cancel{\nu} - \cancel{\frac{1}{2}} \right) \hbar \omega = \hbar \omega, \\ \Delta E_\nu &= \hbar \omega. \end{aligned} \quad (3.48)$$

То есть, изменение энергии при переходе между двумя соседними уровнями будет постоянно для одной и той же частоты осциллятора и классический осциллятор, таким образом, будет излучать одну определённую частоту.

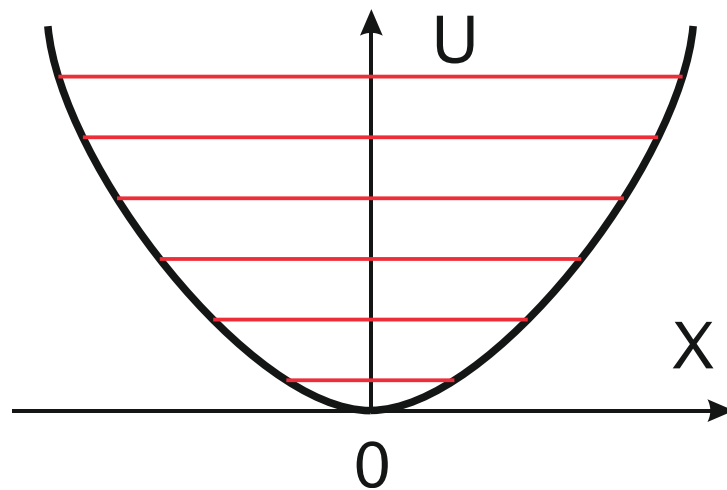


Рисунок 3.11

Энергетические уровни гармонического осциллятора

Это решение ещё пригодится нам в дальнейшем – мы будем использовать его, как один из приближённых методов описания колебательного спектра молекул. Но к этому вопросу мы вернёмся позже.

3.7. Принцип неопределенности Гейзенберга

Без теории операторов

Невозможно точно определить одновременно координату и соответствующую проекцию импульса. Произведение неопределенности координаты и проекции импульса не могут быть по порядку меньше постоянной Планка.

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h, \quad (3.49)$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq h, \quad (3.50)$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq h, \quad (3.51)$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq h. \quad (3.52)$$

(Это из Сивухина. В Савельеве $\hbar/2$)

Из теории волн известно, что для волнового пакета (где «под дельтами» стоят, соответственно, неопределённость волнового числа и неопределённость координаты пакета):

$$\Delta k \cdot \Delta x \approx 2\pi, \quad (3.53)$$

k – волновое число

x – ширина пакета

Для того чтобы создать волновой пакет, необходимо сложить волны разных частот. Чем шире диапазон волн, используемых для создания пакета, тем уже можно сделать сам пакет:

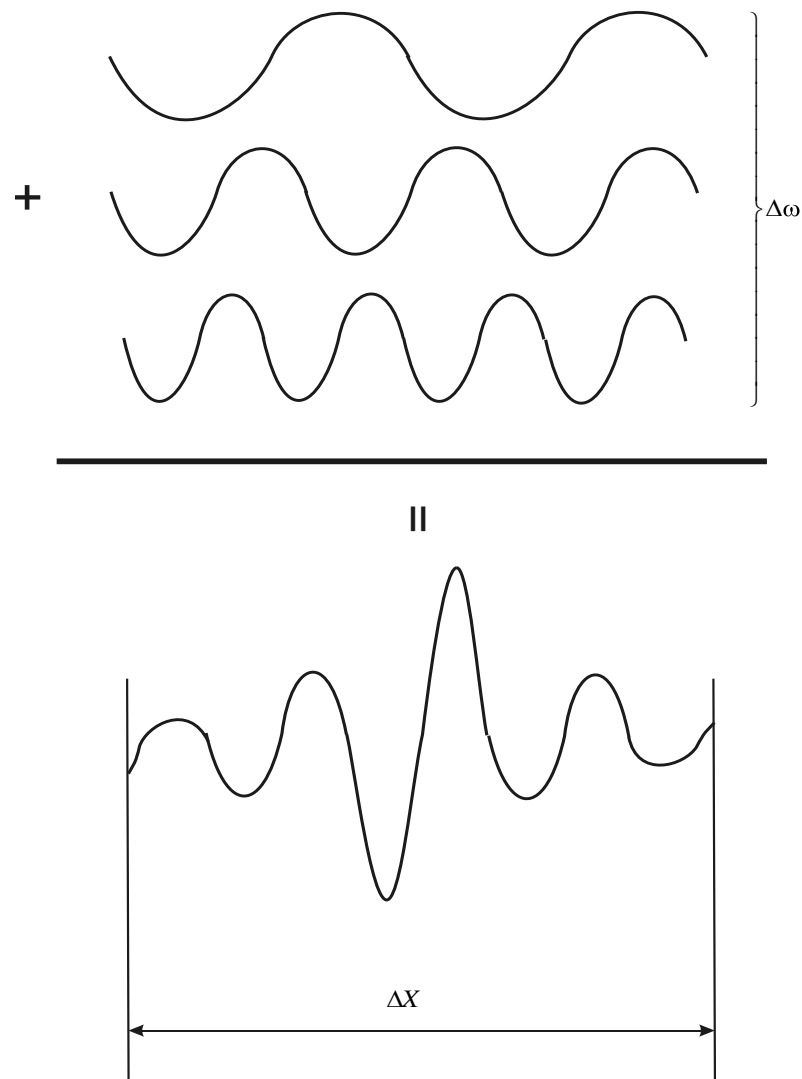


Рисунок 3.12

Волновой пакет, длиной ΔX создан из волн диапазона частот $\Delta\omega$

Из определения волнового числа следует, что изменение частоты $\Delta\omega$ влечет изменение волнового числа на Δk .

$$k = \frac{\omega}{v_{\phi}} \Rightarrow \Delta\omega \rightarrow \Delta k$$

В волне де Бройля волновое число связано с импульсом частицы:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$$

Но тогда и изменение волнового числа также связано с изменением импульса:

$$\Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar}$$

Но тогда:

$$\Delta k \cdot \Delta x \approx 2\pi \Rightarrow \frac{\Delta p}{\hbar} \Delta x \approx 2\pi,$$

$$\Delta p \Delta x \approx 2\pi \hbar = \cancel{2\pi} \frac{h}{\cancel{2\pi}}.$$

Окончательно получаем:

$$\Delta p \Delta x \approx h.$$

Т.о. данное свойство является чисто волновым свойством, характерным для волновых пакетов.

Замечание. Конкретное значение – h или \hbar является, до некоторой степени условностью. По большому счёту, принцип неопределённости звучит, как «... не должно превышать по порядку...». А делить или умножить на 2π здесь, по большому счёту, же не играет никакой роли.

Получено данное соотношение Гейзенбергом было из рассмотрения несколько других свойств.

Гейзенбергом подобные соотношения были получены из рассмотрения умозрительного эксперимента. В общем и целом, подобное соотношение справедливо для любых парных величин. Он рассмотрел умозрительный эксперимент дифракции электрона на щели (реально такую узкую щель не создать, можно наблюдать дифракцию электрона на дифракционной решётке в виде кристалла). За неопределённость координаты им было взято расстояние между двумя первыми дифракционными минимумами. Неопределённость импульса вычислялась из ширины щели – при бесконечно узкой щели $p_y = 0 \Rightarrow \Delta p_y = 0$. При бесконечно большой ширине оба параметра размазываются в бесконечность, но в этом случае электрон мог бы лететь прямо, не испытывая на себе дифракции и не отклоняясь от траектории ($\Delta x = 0$).

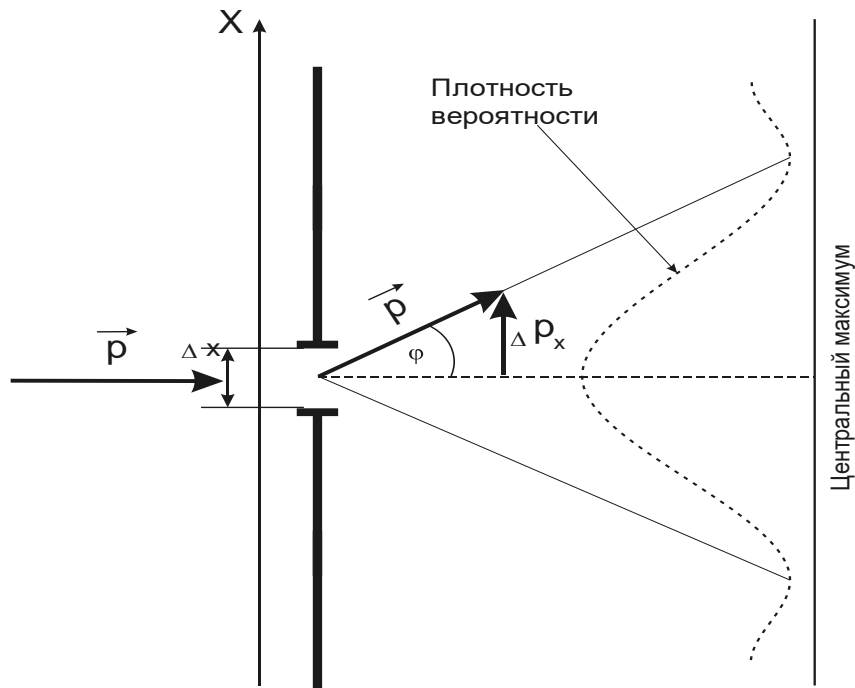


Рисунок 3.13

Умозрительный эксперимент Гейзенберга по дифракции электрона

Как очевидно вытекает из чертежа

$$\Delta p_x = p \sin \varphi$$

Из условия 1-ого дифракционного минимума при дифракции на щели:

$$\sin \varphi = \frac{\lambda}{\Delta x}.$$

Следовательно

$$\left. \begin{array}{l} \Delta p_x \approx p \frac{\lambda}{\Delta x} \\ \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \end{array} \right\} \Delta p_x \approx \cancel{p} \frac{2\pi\hbar}{\Delta x \cancel{p}}.$$

И окончательно имеем:

$$\Delta x \Delta p_x \approx 2\pi\hbar = h$$

Замечание. Важно понимать, что принцип неопределённости утверждает *принципиальное несуществование* одновременно двух этих величин а не нашу неспособность измерить их одновременно. При измерении одной из этих величин вторая просто теряет точное значение. Мы, конечно, могли бы провести серию опытов над эквивалентными системами (скажем, разгонять электроны абсолютно одинаковым напряжением в абсолютно одинаковом направлении) – у одной части совершенно одинаковых электронов мерить импульс, у другой – координаты. Но ставить одновременно те и другие измерения в соответствие одной и той же системе (утверждать, что из данных измерений следует, что подобными

импульсами и координатами в определённый момент обладали бы все электроны) не только не корректно, но и *является грубой ошибкой*. После того, как мы произвели измерение импульса у одной части и координат у другой части наших электронов, это стали уже две совершенно разные системы (оба электрона перестали быть похожими друг на друга)! В данном случае мы имеем в виду, что импульс, измеренный и первой группы электронов, не имеет никакого отношения к электронам, у которых мы измеряли координаты и наоборот. *Больше того*. До того момента, пока мы не произвели измерения, наша система, скажем электрон, вообще не имели ни импульса, ни координаты. Они просто не знали, что это такое!

И вообще, даже если мы решили бы рассчитать тем или иным образом одновременно координату и импульс одного из этих электронов, это тоже не имело никакого смысла. Вернёмся к исходному эксперименту, натолкнувшему Гейзенберга на мысли о принципе неопределённости – к дифракции электрона на щели. По существу, пока электрон *представлял собой волну*, у него отсутствовали и импульс, и координаты. Конечно же некий возможный, вероятный диапазон значений предопределялся свойствами самой волновой функции, но не более... В тот момент, когда мы локализовали координату X электрона, пропустив его через диафрагму (произведя тем самым измерение этой координаты с той или иной степенью точности), мы тем самым *делаколизовали* соответствующую проекцию его импульса («размазали» её).

Пожалуй, наиболее яркой иллюстрацией последнего утверждения является «квантовая телепортация» и парадокс Эйнштейна-Подольского-Розена. Суть парадокса состоит в следующем: рассмотрим распад некоторой частицы A и образование в результате этого распада частиц B и C . Если импульс исходной частицы был нам известен, то, измерив импульс одной из вновь образовавшихся частиц (скажем, B), по закону сохранения импульса ($\bar{p}_A = \bar{p}_B + \bar{p}_C$) мы можем рассчитать импульс второй частицы (скажем, C). В этом случае, измерив координаты второй частицы, мы получаем полный набор её параметров (все координаты и проекции импульса).

Этот парадокс мнению Эйнштейна, говорил о неполноте квантовой механики. Эйнштейн утверждал, что имеются некие скрытые параметры и выполняется так называемый «локальный реализм», когда *локально* в каждом отдельном случае мы можем точно рассчитать параметры и дальнейшее поведение каждой частицы. Бор, бывший его оппонентом в этом споре, что эти параметры вообще не существуют до момента нашего измерения и именно измерение рождает их. Причем, как выяснилось позже, закон сохранения импульса в этом случае ни в коем случае не нарушается, так как вторая частица, будучи «связанной» с первой даже на расстоянии, мгновенно узнаёт о нашей попытке измерить импульс у первой частицы.

Точку в этом споре поставили ряд экспериментов и так называемые неравенства Белла. Теорема Белла указывает, в каких пределах должны лежать значения корреляции этих параметров для одной и другой частиц, в случае наличия скрытых параметров и в случае их отсутствия (в первом случае < 2 , во втором случае $> 2\sqrt{2}$). Выяснилось, что Эйнштейн не прав.

На самом деле *парадокса не существует*. В тот момент, когда мы произведём измерения над частицей B мы в тоже мгновение «размажем» её импульс – его точное значение перестанет существовать. Но в тоже время тоже самое произойдёт и с частицей

D – её импульс приобретёт конкретное значение, а координаты «размажутся в пространстве». Приём произойдёт это мгновенно, в какой бы части пространства, вселенной не находилась вторая частица. Однако данный факт не нарушает принципов теории относительности (СТО). Мы никаким образом не сможем передать таким образом информацию на расстояние. Точнее, для «дешифровки» переданной информации, нам необходимо будет передать из точки, где мы производили эксперимент с частицей *B* в точку, где мы проводим эксперимент с частицей *C*, информацию об условиях эксперимента. И передать её можно только по «обычному» информационному каналу, т.е. со скоростью света *c*. Т.о., причинность в пространстве Минковского СТО при этом не нарушается.

По существу, можно сказать, что об «одновременности событий», о которой идёт речь в СТО и которая определяется исключительно через посылку светового сигнала и одной точки в другую, здесь речи не идёт вообще! Напомним, с точки зрения СТО, одновременными считаются события, связанные между собой световым лучом. Это связано с тем, что на световом конусе, где двигается световой луч время не движется вообще. В этом случае, понятие одновременности перестаёт быть абсолютным, а становится относительным – в разных системах координат, движущихся одна относительно другой, одновременными могут считаться различные события. В данном случае понятие «мгновенно» говорит, вроде бы, об «абсолютной одновременности». Но надо понимать, что это одновременность не в нашем, а в «их, квантовом мире». По крайней мере, судя по имеющимся данным, скорость передачи «квантовой части» информации превосходит 10^4 скоростей света!

Этот эффект получил название «квантовая телепортация», хотя ни о каком «мгновенном перемещении на расстояние», описываемом в фантастической литературе, здесь речи не идёт. Но информация о квантовом состоянии системы, действительно, передаётся на любое расстояние мгновенно. В некотором смысле мы можем сказать, что если до момента взаимодействия мы существовали во вселенной, где оба параметра не имели конкретного значения, то после акта взаимодействия из двух возможных вселенных, в одной из которых определённое значение имеет импульс, а в другой координаты для элементов этой системы, мы автоматически попадаем в одну из них.

В реальных экспериментах речь идёт, конечно, не просто о проявлении принципа неопределённости, связывающем точность определения именно проекции импульса соответствующей координаты частицы. Этот принцип, как мы увидим дальше можно рассматривать гораздо шире и применяться для любых парных параметров. В экспериментах участвуют так называемые «запутанные фотоны» или «запутанные» системы частиц (*«перепутанные системы частиц»*). В этом случае система из 2-х или более частиц описывается одним уравнением Шредингера. Причём ни одна из частиц не находится в так называемом «чистом» состоянии. В этом случае та линейная комбинация собственных волновых функций, в которую раскладывается это состояние, уже принадлежит не одной частице, а всей системе (*описывает сразу всю систему...*).

Квантовая телепортация многократно экспериментально доказан на сегодняшний день. Первым удачным экспериментом была телепортация спина фотона в 1997г. Затем были телепортированы квантовые состояния ионов цезия, телепортация между объектами разной природы фотонами и атомами цезия, телепортация на значительное расстояние и даже на околоземную орбиту. Особый интерес к экспериментам в этом направлении вызван возможным применением их результатов и реальной шифровке информации на совершенно ином, чем ныне существующий уровне. Но «квантовые компьютеры» и кубиты (Q-биты) выходит за рамки нашей программы.

Теория операторов ([пропустить](#))

Из описания идеи квантовой телепортации (см. *мелкий шрифт*) мы уже поняли, что принцип неопределённости не ограничивается импульсом, координатами, энергией и временем. Подобное соотношение справедливо для любых двух парных параметров

$$\Delta Q \cdot \Delta U \geq h, \quad (3.54)$$

и для любых двух парных операторов:

$$\hat{Q}, \hat{U}$$

Получим принцип неопределённости, базируясь на теории операторов и их роли в квантовой механике.

Принцип неопределённости при рассмотрении квантовой механики с точки зрения теории операторов получается, как следствие *некоммутативности действия ряда операторов на волновую функцию*. Если допустимо одновременное измерение двух параметров у одной и той же квантово-механической системы, мы должны иметь возможность измерить их последовательно (*измерить два параметра одновременно невозможно – каждый эксперимент направлен на измерение какого-то одного параметра*). Причём последовательность измерения не должна влиять на их результат. Если в нашей модели измерению параметра в эксперименте сопоставляется действие того или иного оператора на волновую функцию, результат этих действий не должен зависеть от их последовательности. То есть, эти **операторы должны коммутировать друг с другом**. В противном случае коммутатор этих операторов (*величина, получающаяся в результате вычитания их перестановок*) должен быть равен тому, что и стоит в правой части неравенства Гейзенберга.

Попробуем проделать это для операторов координаты и соответствующей проекции импульса:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{x} = x \cdot$$

$$\begin{aligned} \hat{p}_x \circ \hat{x} &= \hat{p}_x (\hat{x}\psi) = -i\hbar \frac{\partial (x \cdot \psi)}{\partial x} = -i\hbar \left(x \cdot \frac{\partial (\psi)}{\partial x} + \psi \frac{\partial (x)}{\partial x} \right) = \\ &= -i\hbar \left(x \cdot \frac{\partial (\psi)}{\partial x} + \psi \right) \end{aligned}$$

$$\hat{x} \circ \hat{p}_x = \hat{x} (\hat{p}_x \psi) = x \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial (\psi)}{\partial x} \right) = -i\hbar \left(x \cdot \frac{\partial (\psi)}{\partial x} \right)$$

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = \hat{p}_x \circ \hat{x} - \hat{x} \circ \hat{p}_x =$$

$$\begin{aligned}
&= -i\hbar \left(x \cdot \frac{\partial(\psi)}{\partial x} + \psi \right) - \left(-i\hbar \left(x \cdot \frac{\partial(\psi)}{\partial x} \right) \right) = \\
&= \cancel{-i\hbar \left(x \cdot \frac{\partial(\psi)}{\partial x} \right)} - i\hbar \psi + \cancel{i\hbar \left(x \cdot \frac{\partial(\psi)}{\partial x} \right)} = -i\hbar \psi \\
&\quad [\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar \psi
\end{aligned}$$

В итоге, коммутатор равен

$$-i\hbar \psi .$$

Неопределённость будет равна модулю величины (числового коэффициента), стоящей перед волновой функцией, в выражении, что мы получили, как коммутатор двух наших операторов. Таким образом, неопределённость – то, на сколько будут различаться величины при их совместном определении, будет равна перечёркнутой постоянной планка, как и предполагалось принципом неопределённости Гейзенберга.

3.8. Момент импульса и энергия вращательного движения

Данный раздел целиком основан на теории операторов. По этому, если вы решили полностью опустить её из рассмотрения, его стоит изучить принимая на веру основной посыл – саму постановку задачи.

Теория операторов ([пропустить](#))

3.8.1. Квантование момента импульса

И так, попробуем теперь решить задачу квантования, напрямую поставив её, как задачу на поиск собственных значений линейного оператора и соответствующих собственных волновых функций. Напомним, постановка задачи для произвольного оператора выглядит следующим образом:

$$\hat{Q}\psi = q\psi , \quad (3.55)$$

где

\hat{Q} – оператор

q – число, собственное значение

Рассмотрим случай квантования момента импульса:

\bar{L} – момент импульса. Его определение в классической механике:

$$\bar{L} = \bar{r} \times \bar{p}$$

либо в других обозначениях для векторного произведения

$$\bar{L} = [\bar{r}, \bar{p}]$$

В квантовой механике ему будет соответствовать оператор момента импульса:

\hat{L} - оператор момента импульса (ещё его называют механическим моментом, поскольку, как мы выясним ниже, точное направление этого вектора неопределено). Его выражение можно получить, используя одно из свойств векторного произведения:

$$\hat{L} = [\hat{r}, \hat{p}] = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ x & y & z \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} & -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} & -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix},$$

$$\hat{L}_x = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (3.56)$$

$$\hat{L}_y = (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) = i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (3.57)$$

$$\hat{L}_z = (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right). \quad (3.58)$$

Момент импульса не является *наблюдаемой*. Если использовать материал и терминологию предыдущего параграфа, три оператора проекций момента импульса не коммутируют попарно одна с другой (*не коммутируют ни одна, ни с одной*). Чтобы узнать значение векторной величины, мы, как известно, должны определить все три её проекции. Но, узнав одну из них, мы сразу лишаемся возможности определить две других исходя из принципа неопределённости.

Наблюдаемыми являются абсолютные значения момента импульса (корень квадратный из скалярного квадрата $\sqrt{a^2} = \sqrt{\vec{a} \cdot \vec{a}}$) и одна из проекций (обычно за неё берут проекцию на ось \mathbf{z}).

Оператор квадрата момента импульса:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2.$$

В сферических координатах (что такое «сферические координаты» мы ещё раз напомним в разделе «Атом водорода по Шредингеру», следующий раздел курса...). Оператор квадрата момента импульса будет выглядеть следующим образом:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \quad (3.59)$$

Из операторов проекций момента импульса наиболее просто будет выглядеть оператор проекции момента импульса на ось z :

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (3.60)$$

Напомним, оператор проекции момента импульса выглядит, как:

$$\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$$

Напомним также, что такое «сферические координаты»:

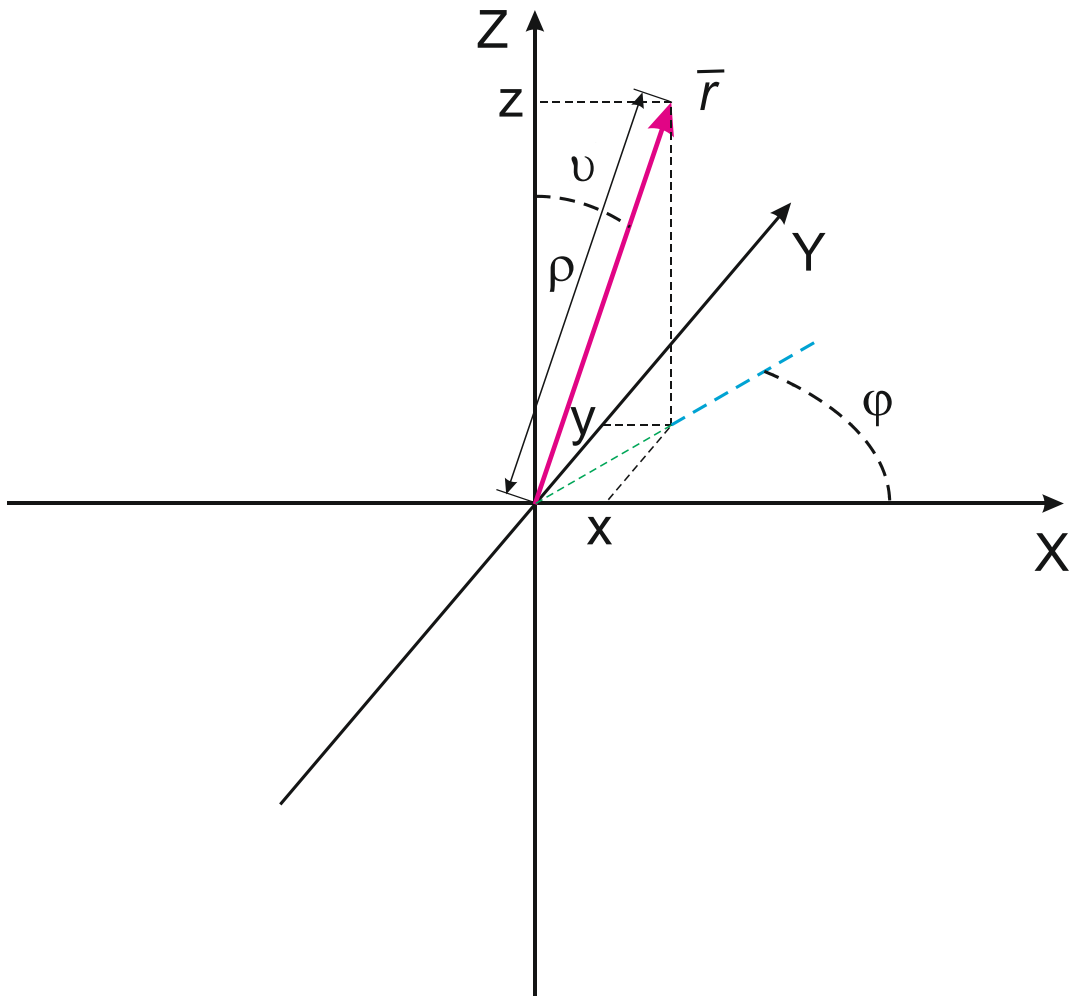


Рисунок 3.14

Сферические координаты

Декартовы координаты вектора $\vec{r} - (x, y, z)$.

Сферические координаты вектора $\vec{r} - (\rho, \vartheta, \varphi)$

В нашем случае переобозначим расстояние до центра ρ как r : $\rho \equiv r$

Постановка задачи на поиск собственного значения квадрата момента импульса:

$$\hat{L}^2 \psi = L^2 \psi . \quad (3.61)$$

Но это уравнение мы решать не будем. Скажем лишь, что *решением этого уравнения будут собственные значения оператора момента импульса:*

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2 , \quad (3.62)$$

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)} , l \in \mathbb{N} . \quad (3.63)$$

(точнее это не решение, а результат квантования).

Здесь l – азимутальное или орбитальное квантовое число. Для атома водорода $l < n$. Этот факт станет очевиден после рассмотрения решения уравнения Шредингера для атома водорода.

Для проекции момента импульса задача на поиск собственных значений оператора будет иметь вид:

$$\hat{L}_z \psi = L_z \psi . \quad (3.64)$$

Мы будем рассматривать выражение для проекции момента импульса в сферических координатах:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

где φ – угол поворота.

Подставим в уравнение:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = L_z \psi . \quad (3.65)$$

Обратим внимание на то, что, вообще-то, здесь у нас опять берётся производная только по одной переменной и мы спокойно можем перейти от частных производных к обыкновенным:

$$-i\hbar \frac{d\psi}{d\varphi} = L_z \psi .$$

Вариант интегрирования уравнения 1 (учебник):

Будем сразу искать решение в следующем виде (*подробности – к курсу математики «решение обыкновенных дифференциальных уравнений»*):

$$\psi = C e^{\alpha \varphi} .$$

Подставим в уравнение:

$$-i\hbar \frac{d(Ce^{\alpha\varphi})}{d\varphi} = L_z Ce^{\alpha\varphi}.$$

Вычислим производную справа по углу φ . После этого можно будет сократить экспоненты и константы интегрирования в правой и левой частях:

$$-i\hbar \cancel{C} \alpha e^{\alpha\varphi} = L_z \cancel{C} e^{\alpha\varphi}.$$

Получили:

$$-i\hbar \alpha = L_z.$$

Отсюда α будет равна:

$$\alpha = -\frac{1}{i} \frac{1}{\hbar} L_z.$$

Подставим α значение в исходное решение:

$$\psi = Ce^{i\frac{L_z}{\hbar}\varphi}.$$

Введём новое обозначение:

$$M := \frac{L_z}{\hbar},$$

и перепишем результат в следующем виде:

$$\psi = Ce^{iM\varphi}.$$

(ниже мы приведём ещё один вариант интегрирования данного уравнения, затем продолжим свои рассуждения)

Вариант интегрирования уравнения 2 (просто попытаемся проинтегрировать):

$$i\hbar \frac{d\psi}{d\varphi} = L_z \psi.$$

Разделим переменные:

$$\frac{d\psi}{\psi} = -\frac{1}{i} \frac{1}{\hbar} L_z d\varphi.$$

Внесём переменную под дифференциал:

$$d(\ln \psi) = i \frac{1}{\hbar} L_z d\varphi.$$

Проинтегрируем правую и левую части:

$$\int d(\ln \psi) = \int i \frac{1}{\hbar} L_z d\varphi.$$

Получим:

$$\ln \psi = i \frac{1}{\hbar} L_z \varphi + C_1$$

По определению натурального логарифма имеем:

$$\psi = e^{i \frac{1}{\hbar} L_z \varphi + C_1}.$$

Обозначим постоянную величину e^{C_1} , как новую постоянную:

$$\psi = \underbrace{e^{C_1}}_C e^{i \frac{1}{\hbar} L_z \varphi},$$

$$\psi = C e^{i \frac{1}{\hbar} L_z \varphi}.$$

Введём промежуточные обозначения:

$$M = \frac{L_z}{\hbar}.$$

В итоге получим:

$$\psi = C e^{iM\varphi}.$$

Далее, не зависимо от выбранного нами метода решения. Будем использовать свойство однозначности волновой функции:

$$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi).$$

Причём, для данной функции, коль скоро она 2π -периодична, в случае мнимого аргумента условие будет выглядеть так:

$$e^{ix} = e^{i(x+2\pi m)}, \quad m \in \mathbb{Z}$$

– условие 2π -периодичности для e^{ix} . Из этого следует:

$$e^{ix_1} = e^{ix_2} \Rightarrow ix_2 = i(x_1 + 2\pi m),$$

$$ix_2 = ix_1 + i2\pi m,$$

$$ix_2 - ix_1 = 2\pi m i.$$

В нашем случае:

$$\psi(\varphi) = C e^{iM\varphi}, \quad \psi(\varphi + 2\pi) = C e^{iM(\varphi + 2\pi)}$$

То есть:

$$C e^{iM\varphi} = C e^{iM(\varphi + 2\pi)},$$

$$e^{iM\varphi} = e^{iM(\varphi + 2\pi)}$$

Таким образом:

$$x_1(\varphi) = M\varphi, \quad x_2(\varphi) = M(\varphi + 2\pi)$$

И условие 2π -периодичности примет вид:

$$x_1 = x_1(\varphi), \quad x_2 = x_2(\varphi)$$

– введённая нами замена переменной.

$$ix_2(\varphi) - ix_1(\varphi) = 2\pi m i,$$

$$iM(\varphi + 2\pi) - iM\varphi = 2\pi m i,$$

$$\cancel{iM\varphi} - \cancel{iM\varphi} + 2\pi M i = 2\pi m i,$$

$$\cancel{2\pi M i} = \cancel{2\pi m i},$$

$$M = m.$$

В итоге, подставляя значение введённой нами величины M , получим:

$$\frac{L_z}{\hbar} = m \Rightarrow L_z = m\hbar,$$

где

m – магнитное квантовое число.

L_z – собственное значение проекции момента импульса.

Квантовое число m (целое число m) определяет проекцию момента импульса на выбранную ось, т.е. ориентацию орбитали в пространстве. Магнитным квантовым числом оно называется, потому что экспериментально обнаружить этот факт можно по расщеплению спектра атома в магнитном поле.

Собственная волновая функция будет иметь в этом случае вид:

$$\psi = C e^{im\varphi}, \quad (3.66)$$

где константу C нужно искать из условия нормировки. Мы не будем делать этого. Чуть ниже мы запишем общий вид собственной волновой функции момента импульса (чисто для справки...).

Поскольку проекция вектора не может по абсолютной величине превосходить абсолютной величины самого вектора, для двух полученных квантовых чисел получаем следующее соотношение:

$$|m\hbar| \leq \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

$$m^2 \leq l^2 + l$$

$$m \in \{-l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l\}. \quad (3.67)$$

Так же отметим, что орбитальное квантовое число ℓ (квантование момента импульса по абсолютной величине) принято обозначать строчными латинскими буквами:

$s, p, d, f, g \dots$ соответствуют значениям $\ell = 0, 1, 2, 3, 4 \dots$

Собственные функции оператора момента импульса.

В конечном счёте, собственные функции для оператора момента импульса (по абсолютному значению и одной из проекций) будут выглядеть следующим образом:

$$Y_{lm}(\varphi, \vartheta) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \vartheta), \quad (3.68)$$

где $P_l^m(\cos \theta)$ – полиномы Лежандра:

$$P_n^m(\cos \theta) = \sin^m \theta \frac{d^m}{d(\cos \theta)^m} P_n(\cos \theta),$$

$$P_n(\cos \theta) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{d(\cos \theta)^n} (\cos^2 \theta - 1)^n,$$

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k}^2 (x-1)^{n-k} (x+1)^k.$$

Данные полиномы и полученные решения относятся к разделу математики «Специальные функции»...

Нам ещё пригодится эта информация.

3.8.2. Жесткий ротатор

Понятие момента импульса тесно связано с вращением тела или системы. Рассмотрим эту связь и получим правило квантования *жесткого ротатора* – системы, способной совершать вращательное движение, не меняя свои размеры и, следовательно, не меняя момент инерции.

Вспомним формулу, выражающую кинетическую энергию вращательного движения в классической механике. Вспомним и немного преобразуем её:

$$T_\omega = \frac{I\omega^2}{2} = \frac{I^2\omega^2}{2I} = \frac{(I\omega)^2}{2I}. \quad (3.69)$$

Если при этом заметить, что в числителе выражения стоит момент импульса системы в выражении через момент инерции и угловую скорость вращения, выражение примет вид:

$$L = I\omega \Rightarrow T_\omega = \frac{(I\omega)^2}{2I} = \frac{L^2}{2I}. \quad (3.70)$$

А теперь, по обыкновению, заменим физические величины классической механики на их операторы в квантовой механике:

$$\hat{E} = \frac{\hat{L}^2}{2I}. \quad (3.71)$$

Обратите внимание, момент инерции для жесткого ротатора мы считаем константой и не превращаем в оператор. По сути, это такое же число, как и \hbar^2 .

Очевидно, что такая же связь будет и для собственных значений этих операторов. (В конце концов, мы можем просто повторить решение уравнения, эти два уравнения будут отличаться умножением на константу: $\frac{1}{2I}$). В итоге получим:

$$E_r = \frac{L_l^2}{2I} = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) = \frac{\hbar^2}{2I} r(r+1). \quad (3.72)$$

Заметьте, здесь мы перешли от орбитального квантового числа l к вращательному квантовому числу r .

Правило отбора, выполняющееся в данном случае, будет запрещать все переходы (*изменения*), кроме переходов с изменением квантового числа r на единицу:

$$\Delta r = \pm 1. \quad (3.73)$$

Что касается разницы энергий между двумя соседними уровнями, то очевидно, что она будет расти с ростом квантового числа r . Для начала рассмотрим переход с уровня $r-1$ на уровень r :

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{r-1} - E_r = \frac{\hbar^2}{2I} ((r-1)r - r(r+1)) = \\ &= \frac{\hbar^2}{2I} (\cancel{r^2} - r - \cancel{r^2} - r) = \frac{\hbar^2}{2I} (-2r) = -\frac{\hbar^2}{I} r, \\ \Delta E_{(r-1)-r} &= \frac{\hbar^2}{I} r. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Энергия этого перехода пропорциональна самому квантовому числу r . Теперь вернёмся к стандартному представлению и рассмотрим переход $r \rightarrow r+1$. для этого вместо r просто подставим $r+1$:

$$\Delta E_{(r)-(r+1)} = \frac{\hbar^2}{I} (r+1). \quad (3.75)$$

Учитывая, что при переходе испускается или поглощается квант энергии $E = \hbar\omega$, получаем:

$$\Delta E_{\text{перехода}} = E_{\text{кванта}} = \hbar\omega \Rightarrow \hbar\omega = \frac{\hbar^2}{I} (r+1).$$

Тогда частота излучения будет составлять:

$$\omega_r = \frac{\hbar}{I} (r+1) = \omega_1 (r+1). \quad (3.76)$$

Без теории операторов

Если Вы при изучении материала пропустили теорию операторов и сначала изучали материал в исходном, наводящем на рассуждения виде, но, всё же собираетесь изучить его до конца (вернуться к изучению квантовой механике на языке теории операторов) то это то самое место, где стоит сказать:

«Ага! Так всё, что мы делали до этого, используя лишь уравнение Шредингера и свойства волновой функции, есть не что иное, как решение задачи на поиск собственных значений и собственных векторов линейного оператора в Гильбертовом пространстве! А будут ли справедливы подобные действия в отношении других операторов, кроме оператора энергии»

И смело ответить: «Да!»

Теперь Вам стоит вернуться назад и перейти к изучению раздела «[Краткая теория операторов](#)» и далее следуя по тексту, выделенному, как «Теория операторов».

4. Атом водорода

4.1. Уравнение Бальмера

Уравнение Бальмера является эмпирическим уравнением, описывающим спектр излучения атомарного водорода. Оно было написано не исходя ни из каких теоретических предпосылок. Просто оказалось, что полученный экспериментальным путём набор цифр – длин волн, на которых наблюдается излучение при исследовании свечения атомарного водорода, хорошо укладываются в последовательность, описываемую достаточно простой математической формулой.

Возвращаясь к более точному стилю изложения, определимся. Под спектром излучения будем понимать ту картинку, которая получается при разложении в спектр излучения той или иной природы, скажем, после прохождения через дифракционную решётку. С математической точки зрения под спектром будем понимать соотношение интенсивности излучения и чего частоты. Спектр атома водорода (*как, в общем-то, и любой атомарный спектр*) имеет линейчатую структуру. То есть на экране мы будем видеть ряд узких полос разных цветов, соответствующих разным частотам (*или длинам волн*). С зависимостями, которые определяют эти частоты (*или длины волн*) мы и будем разбираться.

Под атомарным спектром в свою очередь мы будем понимать спектр, излучаемый веществом, находящемся в атомарном состоянии. Этого можно достичь, скажем, нагрев вещество в вольтовой дуге без доступа кислорода. Ну, или каким-то другим способом.

Как было сказано выше, спектр излучения атома водорода описывается формулой Бальмера.

В исходном виде она имеет вид (*как её написал Бальмер*):

$$\lambda = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 4}, \quad n \in \mathbb{N}, n > 2. \quad (4.1)$$

Чаще эту формулу представляют в преобразованном виде:

$$\frac{1}{\lambda} = R_\lambda \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (4.2)$$

где

n – номер линии (*в серии Бальмера*).

Формула Бальмера описывала линии видимой части спектра водорода, открытые первыми. В последствии были открыты и другие линии в других сериях. Оказалось, что и они могут быть описаны подобной формулой, только в чуть расширенном варианте. Эта формула получила название обобщённой формулы Бальмера.

Обобщенная формула Бальмера:

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\lambda} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Так же можно записать подобную формулу и для частоты:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \Rightarrow \frac{\nu}{c} = R_{\lambda} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$\nu = R_{\nu} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad R_{\nu} = cR_{\lambda}$$

$$n_1, n_2 \in \mathbb{N}$$

$$n_1 > n_2 \quad ,$$

где

n_1, n_2 – натуральные числа (**номер серии и номер линии в серии**).

Позже мы поймём, что это главные квантовые числа орбиты (или орбитали), с которой и на которую перешёл электрон (это нам ещё предстоит доказать в разделе «Связь формулы Бальмера со строением атома»). Надо понимать, что на момент написания формулы ещё не было адекватной модели, описывающей процессы, происходящие при излучении или поглощении света. Данная формула – есть эмпирическая формула, позволившая связать экспериментально полученные длины волн для спектра атома водорода. Связь этих формул со строением атома и процессами, происходящими в нём при излучении или поглощении света была обнаружена позже. Так же позже был придан смысл числам, которые исходно являлись номерами серии и линии в серии, как двум главным квантовым числам.

$R_{\lambda} = 109737.3177 \pm 0.0083 \text{ см}^{-1}$ – постоянная Ридберга.

Рассматриваемое уравнение оказалось удобным (без особого осознания смысла проводимых математических манипуляций) представлять в виде разности **термов**:

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\lambda} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = \frac{R_{\lambda}}{n_1^2} - \frac{R_{\lambda}}{n_2^2} = T(n_1) - T(n_2),$$

где
$$T(n) = \frac{R_{\lambda}}{n^2} \quad \text{– терм.}$$

То есть, волновое число (величина, обратная длине волны) равна разности термов номера линии и номера серии. Физический смысл термов тогда был ещё непонятен. Мы разберём его несколько позже.

4.2. Строение атома водорода

4.2.1. Атом водорода по Бору

Начиная с античных времён и Демокрита сторонники атомарной теории считали, что *атом* – мельчайшая неделимая частичка вещества, считая его неким «камушком», который дальше уже никак нельзя разделить на части.

Первой конструктивной моделью атома была модель Томсона. Своим возникновением она обязана открытию *электрона* (1897 год, эксперимент Томсона по изучению катодных лучей). Открытие отрицательно заряженных частиц вызвало необходимость «где-то поселить» их внутри вещества. Модель атома водорода по Томсону – «булка с изюмом». Положительно заряженный объём, в котором как изюм, натканы электроны.

Модель атома водорода по Резерфорду – «планетарная модель». Электроны движутся по круговым орбитам вокруг ядра. Модель – результат экспериментального доказательства того факта, что в атоме положительный заряд сосредоточен в достаточно компактном ядре, гораздо меньшего размера, чем сам атом (опыты Резерфорда). Но движение по круговой орбите есть движение с ускорением – заряженная частица электрон должен постоянно излучать и при этом терять энергию. Теряя энергию, электрон будет постепенно спускаться по орбите (*радиус орбиты будет уменьшаться*), пока не упадёт на ядро – этом прекратит своё существование. Однако, этого не наблюдается.

Постулаты Бора:

1. Электрон в атоме может находиться только на определённых стационарных орбитах. Находясь на этих орбитах (*двигаясь по этим орбитам*), электрон не излучает.
2. Излучение происходит при переходе электрона с орбиты с большей энергией на орбиту с меньшей энергией (*с более высокой на более низкую*). При этом переходе излучается фотон с энергией, равной разности энергий этих орбит. При поглощении фотона электрон переходит с орбиты с меньшей энергией (*более низкой*) на орбиту с большей энергией (*более высокую*).

1-ый постулат Бора:

$$L_n = \hbar n$$

$$r_n \cdot p = \hbar n$$

$$r_n m_e v = \hbar n$$

$$r_n = \frac{\hbar n}{m_e v}$$

2-ой постулат Бора:

$$E_\phi = E_{n2} - E_{n1}$$

Волновая модель:

Длина волны де Бройля:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv}$$

Условие возникновения стоячей волны:

$$2\pi r_n = n\lambda.$$

Если условие стационарности орбиты есть условие образования на ней стоячей волны де Бройля, имеем:

$$\begin{aligned} 2\pi r_n &= \frac{2\pi\hbar n}{mv} \\ r_n &= \frac{\hbar n}{m_e v} \end{aligned}$$

Энергия и радиус Боровской орбиты:

По II закону Ньютона имеем:

$$\begin{aligned} F_{\text{кул}} &= ma_{\text{ц.с.}} \\ \frac{ze^2}{r_n^2} &= \frac{mv^2}{r_n} \end{aligned}$$

Заметьте, мы незаметно перешли с системы единиц СИ на СГС.

$$\frac{ze^2}{r_n} = mv^2 \tag{4.3}$$

$$r_n = \frac{\hbar n}{m_e v} \Rightarrow v = \frac{\hbar n}{m_e r_n}, \quad v^2 = \frac{\hbar^2 n^2}{m_e^2 r_n^2}$$

Подставим радиус стационарной орбиты в выражение (4.3):

$$\frac{ze^2}{\cancel{r_n}} = \frac{\hbar^2 n^2 \cancel{m_e}}{m_e^2 \cancel{r_n^2}}$$

Получили радиус Боровской орбиты:

$$r_n = \frac{\hbar^2 n^2}{m_e ze^2}$$

Потенциальная энергия:

$$U = \frac{q_1 q_2}{r_n} = \frac{(-e)(ze)}{r_n} = -\frac{ze^2}{r_n}$$

Рассмотрим соотношение (1):

$$\left. \begin{aligned} \frac{ze^2}{r_n} = m_e v^2 \\ U = \frac{ze^2}{r_n} \end{aligned} \right\} \Rightarrow U = m_e v^2$$

$$\left. \begin{aligned} U = m_e v^2 \Rightarrow \frac{U}{2} = \frac{m_e v^2}{2} \\ T = \frac{m_e v^2}{2} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{1}{2}U = T$$

Учитывая, что потенциальная энергия электрона в атоме меньше нуля, получаем:

$$E_n = T - U = \frac{1}{2}U - U = -\frac{1}{2}U = -\frac{ze^2}{2r_n}$$

Подставляя значения для радиусов орбит, окончательное выражение для энергии будет:

$$E_n = -\frac{m_e z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

4.2.2. Атом водорода по Шредингеру

Запишем уравнение Шредингера для атома водорода и попытаемся найти его решение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi,$$

где потенциальная энергия – это энергия кулоновского поля:

$$U = -\frac{ze^2}{r}$$

\mathbf{z} – заряд (число протонов),

U – потенциальная энергия электрона в поле ядра (СГС).

В итоге:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{ze^2}{r} \psi = E\psi$$

Преобразуем выражение:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) \psi = 0$$

Поле, в котором находится электрон центрально-симметричное, поэтому логично перейти к сферическим координатам. Подставим в уравнение выражение для оператора Лапласа в сферических координатах (см. курс материального анализа и учебник Савельева):

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) \psi = 0.$$

Напомним, что такое «сферические координаты»:

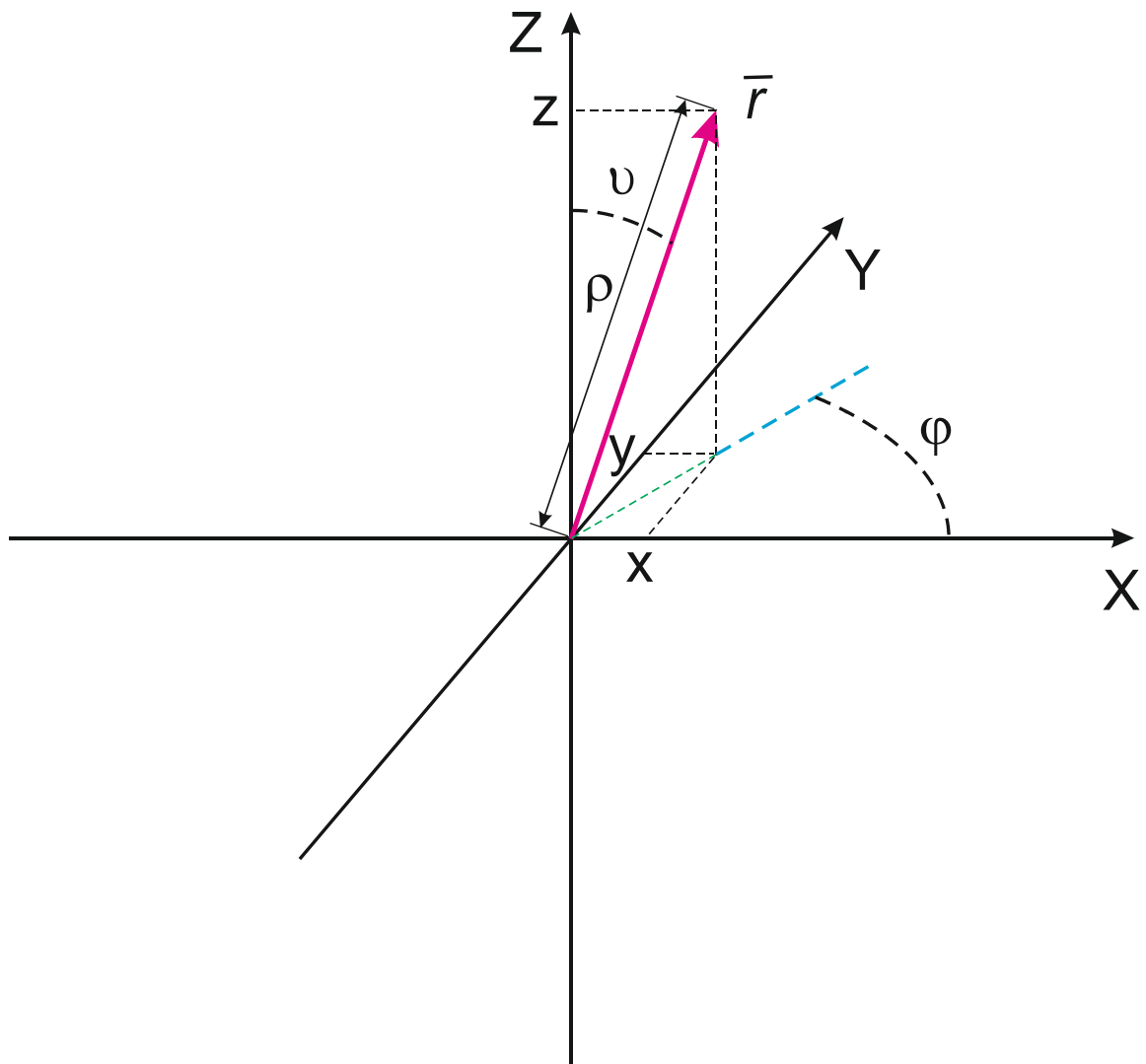


Рисунок 4.1

Сферические координаты.

Декартовы координаты вектора $\vec{r} - (x, y, z)$.

Сферические координаты вектора $\vec{r} - (\rho, \vartheta, \varphi)$.

В нашем случае переобозначим расстояние до центра ρ как r : $\rho \equiv r$

Далее это уравнение можно решить, но решать его мы не будем!

Выводы по решению:

1. Энергетический спектр является непрерывным для положительных значений энергии (*электрон не находится на орбитале, а просто пролетает мимо...*) и дискретным (*бесконечным*) для отрицательных значений. Спектр отрицательных энергий:

$$E = \frac{m_e e^4 z^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n \in \mathbb{N}$$

Это же уравнение подходит для водородоподобных ионов – ионов, где на оболочке остался только один электрон (с соответствующим зарядом ядра z).

2. Полученное решение для собственных волновых функций является параметризованным тремя числами – n, ℓ, m .

$$\Psi_{n,\ell,m} = \Psi_{n,\ell,m}(x, y, z)$$

Надо отдавать отчёт, что данное решение (*данный вид собственных волновых функций*) не является решением только лишь приведённого выше уравнения (*уравнения Шредингера*). Очевидно, что наше уравнение является сферически-симметричным – ни один из его параметров не зависит от углов поворота. Решая это уравнение и только его, мы ни коим образом не можем получить выражение волновых функций, зависящих от углов ν и φ . Прimitивно говоря, мы не можем получить никакого решения, кроме системы сфер и шариков, окружающих наше атомное ядро.

Для получения нужного нам решения, которое будет описывать *форму орбиталей*, мы вынуждены привлекать некие другие, внешние условия и дополнительные уравнения. Если говорить конкретнее, мы вынуждены также учитывать квантование момента импульса, полученное несколько раньше.

Немного поясним. Вспомним историю написания нами уравнения Шредингера (мы называли это *выводом*, хотя с точки зрения математики, да и физики вводом эти рассуждения на являлись). Первоначально мы исходили из формулы связи кинетической энергии и импульса:

$$E_{к,в} = \frac{p^2}{2m}.$$

Затем обобщали эту формулу до операторного вида (трансформировали на случай квантовой механики):

$$\hat{E}_{к,в} = \frac{\hat{p}^2}{2m}.$$

Дело в том, что, рассматривая атом водорода мы рассматриваем обобщение, перевод на язык квантовой механики случая движения электрона по круговой орбите (речь идёт об отрицательных энергиях, когда электрон находится в связанном с ядром состоянии). То есть, речь идёт о вращательном движении. А для вращательного движения эта взаимосвязь, как уже отмечалось, имеет вид:

$$E_{\kappa,\omega} = \frac{L^2}{2I},$$

$$\hat{E}_{\kappa,\omega} = \frac{\hat{L}^2}{2I}.$$

Не странно, что это соотношение появится и в нашем уравнении. Но дело в том, что мы уже решали задачу на *квантование момента импульса*. И из решение этой задачи нам точно известно, что момент импульса будет принимать только дискретные значения, индексированные целым числом ℓ (орбитальным или азимутальным квантовым числом):

Только их мы и должны учитывать при решении нашей задачи.

Таким образом, в том месте в нашем уравнении, где оператор момента импульса действует на волновую функцию

$$\hat{L}^2 \psi,$$

мы должны заметить эту комбинацию на имеющееся у нас решение:

$$L_l \psi$$

или

$$l(l+1)\hbar^2\psi.$$

Отсюда появление в решении квантового числа ℓ . Ну, уж коль скоро нашем значении зашла речь о собственных значения момента импульса (полученная из решения уравнения Шредингера волновая функция будет определять лишь плотность вероятности обнаружения частицы с той или иной энергией), наше решение нужно домножить на другое решение, которое будет определять плотность вероятности обнаружения у нашей частицы того или иного значения момента импульса. Точнее его абсолютного значения и одной из проекций. А вот здесь уже появится не только квантовое число ℓ , но и квантовое число m .

Мы вынесем за рамки основного текста более конкретные рассуждения на данную тему и приведём их мелким шрифтом.

Более точно. *Первый вариант.*

Вернёмся к исходному уравнению. Но запишем его не в виде, удобном для последующего решения, как дифференциального уравнения, а в виде, в котором мы его исходно получили:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi .$$

Но запишем его в сферических координатах и подставим туда потенциальную энергию кулоновского поля атомного ядра:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) + \left(-\frac{ze^2}{r} \right) \psi = E\psi$$

Если переписать это уравнение в операторном виде:

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

то выражение для гамильтониана будет выглядеть следующим образом:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + \left(-\frac{ze^2}{r} \right) .$$

Или, преобразовав его:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2m_e r^2} \left(\underbrace{-\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)}_{\hat{L}^2} \right) + \left(-\frac{ze^2}{r} \right)$$

Здесь мы учли, что потенциальная энергия кулоновского поля отрицательна и имеет следующий вид:

$$U(r) = -\frac{ze^2}{r} .$$

Также мы заметили, что в скобках второго слагаемого *в чистом виде* находится *оператор квадрата момента импульса*:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) .$$

Тогда окончательный вид гамильтониана будет выглядеть так:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2m_e r^2} + \hat{U}(r) .$$

Здесь мы приняли, что оператор потенциальной энергии имеет вид:

$$\hat{U}(r) = U(r)$$

и

$$\hat{U}(r) = -\frac{ze^2}{r} .$$

Второе слагаемое гамильтониана заменено нами на следующее выражение через оператор квадрата момента импульса:

$$\frac{\hat{L}^2}{2m_e r^2}.$$

Причём здесь отдельно заметим: если $\hat{U}(r) = U(r)$ или $\hat{U}(r) = -\frac{ze^2}{r}$ – оператор потенциальной энергии кулоновского поля, зависящей только от расстояния до центра, то $\frac{\hat{L}^2}{2m_e r^2}$ – может быть воспринят, как оператор энергии вращательного движения. Заметим,

что, когда мы строили модель атома водорода по Бору, мы явно учитывали кинетическую энергию вращательного движения. В данной модели она преобразуется в подобный оператор...

Вспомним классическую механику. Кинетическая энергия вращательного движения там может быть рассчитана следующим образом:

$$T_\omega = \frac{I\omega^2}{2} = \frac{I^2\omega^2}{2I} = \frac{(I\omega)^2}{2I}.$$

Если также вспомнить выражение для проекции момента импульса через момент инерции и угловую скорость, то выражение примет вид:

$$L = I\omega \Rightarrow T_\omega = \frac{(I\omega)^2}{2I} = \frac{L^2}{2I}.$$

Для движения частицы по круговой орбите вокруг ядра (*в первом приближении будем считать именно так*), подставляя выражение для момента импульса, получаем:

$$I = mr^2 \Rightarrow T_\omega = \frac{L^2}{2I} = \frac{L^2}{2m_e r^2}.$$

Переходя от классических соотношений к операторным выражениям (*как это было при операторном выводе уравнения Шредингера*), получаем следующий вид оператора кинетической энергии вращательного движения:

$$\hat{T}_\omega = \frac{\hat{L}^2}{2m_e r^2}.$$

Или, переходя к *собственным значениям* оператора квадрата момента импульса:

$$\hat{T}_\omega \psi = T_\omega \psi \Rightarrow \frac{\hat{L}^2}{2m_e r^2} \psi = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} \psi = \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} l(l+1) \psi.$$

Обратим также внимание на следующие два факта. Во-первых, как и в модели атома водорода по Бору, знак у её будет противоположен знаку потенциальной энергии кулоновского поля. Во-вторых, эта энергия будет квантоваться, причём квантоваться вместе с абсолютным значением момента импульса. Отметим также, что от углов φ и ϑ здесь не зависит ни один параметр!

Отдельно отметим, что, конечно же, говоря о модели атома водорода по Шредингеру, рассматривать какое-либо реальное вращательное движение было бы совершенно неправильно. В данном случае мы говорим лишь о той части энергии, которая в модели атома водорода по Бору соответствовала энергии вращательного движения электрона по орбите. Независимо от того, как мы представляем электрон в атоме водорода – как вращающуюся по орбите частицу, как стоячую волну или просто говорим о состоянии некоей системы, эта часть энергии будет присутствовать у электрона. Приписывание же ей физического смысла «энергии вращательного движения», есть не что

иное, как попытка провести параллели между квазиклассической и квантовой моделями атома.

Далее. Теперь вспомним, что собственные значения оператора момента импульса будут иметь вид:

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1).$$

То есть, решение задачи на поиск собственных значений данного оператора даст нам следующий результат:

$$\hat{L}^2 \psi = L^2 \psi \Rightarrow \hat{L}^2 \psi = \hbar^2 l(l+1) \psi.$$

И именно его и надо подставить в наше уравнение. Получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} l(l+1) \psi - \frac{ze^2}{r} \psi = E \psi.$$

Теперь обратим внимание, что в нашем уравнении все коэффициенты зависят только от радиальной координаты (от радиуса r). Получить из него решение, зависящее от угловых координат просто невозможно. В этом случае наша волновая функция может иметь только подобный вид:

$$\psi = R(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi)$$

– она будет представлять собой произведение радиальной и угловой части.

Тогда, подставив это выражение в уравнение, мы получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial (R(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi))}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} l(l+1) R(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi) - \frac{ze^2}{r} R(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi) = ER(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi).$$

Выносим сомножитель, зависящей только от углов из под знака производной по радиусу и сокращаем его:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) \cdot \cancel{Y(\vartheta, \varphi)} + \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} l(l+1) R(r) \cdot \cancel{Y(\vartheta, \varphi)} - \frac{ze^2}{r} R(r) \cdot \cancel{Y(\vartheta, \varphi)} = ER(r) \cdot \cancel{Y(\vartheta, \varphi)}.$$

Получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} l(l+1) R(r) - \frac{ze^2}{r} R(r) = ER(r).$$

И окончательно перепишем уравнение в более удобном для решения с точки зрения математики виде:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - l(l+1) R + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) R = 0,$$

$$r^2 \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) R - l(l+1) R = 0.$$

В данном дифференциальном уравнении есть только одна координата производная только по этой координате – не уменьшая общности, переходим от частных к обыкновенным производным.

$$r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) R - l(l+1)R = 0$$

Последнее уравнение перестаёт быть столь страшным, как исходное и его уже можно решать! ☺ Хотя это всё равно не так просто.

Второй вариант. Более простой и менее строгий.

Учитывая, что ни один из параметров исходного уравнения не зависит от угловых переменных, мы можем, не задумываясь, записать нужное нам уравнение, как уравнение только для радиальной координаты:

$$r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) R = 0.$$

И затем, вспомнив, что вращающийся по орбите электрон, помимо потенциальной, будет иметь ещё и кинетическую энергию, просто вычтём её из полной энергии (ну, либо прибавим к потенциальной, учитывая, что та сама имеет отрицательный знак):

$$r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} \right) R = 0.$$

И окончательно, вынеся данное слагаемое за скобки, получим уравнение, аналогичное полученному по первому варианту:

$$r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) R - l(l+1)R = 0.$$

Можно преступать к решению, отдавая отчёт в том, что данное решение будет определять лишь вероятность нахождения электрона на том или ином удалении от ядра!

И ещё *пару слов об общем виде решения*, как произведения радиальной и угловой составляющих. Полученная из данного уравнения функция **R** будет иметь смысл плотности вероятности нахождения электрона на том или ином удалении от ядра (*от центра*). В случае, если бы у нас не было никаких дополнительных условий, накладываемых на вероятность обнаружения электрона в том или ином угловом секторе, мы получили бы систему решений, соответствующих набору *s*-орбиталей. В итоге область наиболее вероятного обнаружения электрона в атоме представляла бы собой набор сферических поверхностей с радиусами, равными радиусам боровских орбит.

Однако, если у нас есть дополнительное условие, из которого мы можем вычислить плотность вероятности обнаружения электрона с тем или иным набором значений координат **U** и **φ**, мы должны умножить наше решение на эту плотность вероятности. Смысл простой – вероятность обнаружения электрона в объёме, ограниченном некоторыми значениями координат **r**, **U** и **φ** есть условная вероятность обнаружения электрона в некотором диапазоне **r**, при условии обнаружения у него угловых координат в некотором диапазоне **U** и **φ**. А условные вероятности умножаются!

Напомним, что условная вероятность (*вероятность того, что одно из событий произойдёт при условии, что произойдёт другое*) независимых событий равняется произведению вероятностей каждого из событий. Отсюда имеем. Вероятность того, что частица будет обнаружена в некотором объёме, при условии, что для неё существуют

собственные функции для ряда операторов, будет вычисляться через квадрат модуля волновой функции, являющейся произведением собственных волновых функций каждого из операторов. В нашем случае это произведение такими волновыми функциями будут собственные волновые функции оператора энергии $R(r)$ и собственные волновые функции оператора момента импульса $Y(\mathcal{G}, \varphi)$.

Итак. Собственное значение волновой функции будет иметь следующее выражение:

$$\psi_{n,l,m} = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\mathcal{G}, \varphi),$$

где $R_{nl}(r)$ – результат квантования (поиска собственных значений и собственных функций) оператора энергии, то есть решения уравнения Шредингера:

$$R_{nl}(r) = e^{-\frac{zr}{n}} r^l \sum_{k=0}^{n-l-1} a_k r^k,$$

a_{k+1} – определяется рекуррентной формулой:

$$a_{k+1} = \frac{2z}{n} \cdot \frac{(k+l+1-n)}{(k+l+2)(k+l+1)-l(l+1)} a_k,$$

$Y_{lm}(\mathcal{G}, \varphi)$ – результат квантования момента импульса, рассмотренный выше в разделе «Квантование момента импульса» Квантовой механики:

$$Y_{lm}(\varphi, \mathcal{G}) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \mathcal{G}),$$

где $P_l^m(\cos \theta)$ – полиномы Лежандра:

$$P_n^m(\cos \theta) = \sin^m \theta \frac{d^m}{d(\cos \theta)^m} P_n(\cos \theta),$$

$$P_n(\cos \theta) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{d(\cos \theta)^n} (\cos^2 \theta - 1)^n,$$

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k}^2 (x-1)^{n-k} (x+1)^k.$$

Главным выводом из вышеприведённых рассуждений мелким шрифтом должна быть следующая мысль:

– утверждение, что «полученное выражение для собственных волновых функций электрона в атоме водорода является параметризованным тремя числами – n, l, m , то есть имеет вид:

$$\Psi_{n,l,m} = \Psi_{n,l,m}(x, y, z),$$

как и сам вид этих волновых функций, является не результатом решения одного лишь уравнения Шредингера применительно к атому водорода, а результатом решения следующей системы уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) \psi = 0 \\ \hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) = L^2 \psi \\ -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = L_z \psi \end{array} \right.$$

Но вернёмся к физическому смыслу полученного решения и физическому смыслу его параметров. С точки зрения решения уравнения величины n , ℓ и m , всего лишь, целочисленные параметры, отвечающие различным возможным решениям этого уравнения. С точки зрения спектра операторов они нумеруют спектры оператора энергии, абсолютного значения и проекции момента импульса. С точки зрения строения и свойств атома эти числа – главное, орбитальное (или азимутальное) и магнитное квантовые числа.

Так же отметим, что из приведённого решения $R_{nl}(\rho)$ видно (см. *мелкий шрифт*), что орбитальное квантовое число ℓ всегда будет меньше главного квантового числа n . Соотношение между магнитным квантовым числом m и орбитальным квантовым числом ℓ уже разбиралось нами при решении задачи на квантование момента импульса:

$$\begin{array}{l} \ell < n, \\ |m| \leq \ell. \end{array}$$

3. Данное решение является вырожденным по орбитальному и магнитному квантовым числам – энергия электронов при одинаковом n и различных m и ℓ одинакова. В частности, вырождение энергетического спектра по орбитальному квантовому числу выражается в том, как мы увидим ниже сари Бальмера в спектре атома водорода будут соответствовать сразу несколько переходов: $2s \rightarrow np$, $2p \rightarrow ns$, $2p \rightarrow nd$. Вырождение энергетического спектра по квантовому числу ℓ снимается уже у лития (Li) с началом заполнения второй электронной оболочки. Но об этом мы поговорим, рассматривая спектры излучения щелочных металлов.

4.2.3. Связь формулы Бальмера со строением атома

Энергия поглощённого/излучённого фотона:

$$E_{\phi} = h\nu = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}$$

Энергия электрона на одной и другой Боровской орбите или орбитали Шредингера:

$$E_n = -2 \frac{m_e e^4 z^2}{2\hbar n^2}$$

По закону сохранения энергии:

$$E_{\phi} = E_{n_2} - E_{n_1}.$$

Дальше подставляем и преобразуем...

$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda} = \frac{m_e e^4 z^2}{2\hbar n_1^2} - \frac{m_e e^4 z^2}{2\hbar n_2^2}$$
$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda} = \frac{m_e e^4 z^2}{2\hbar} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Мы получили формулу Бальмера и выражения для постоянной Ридберга:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{m_e e^4 z^2}{4\pi\hbar^2 c} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$
$$\frac{1}{\lambda} = R_{\lambda} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad R_{\lambda} = \frac{m_e e^4 z^2}{4\pi\hbar^2 c}.$$

По существу, основной задачей, которую мы решали, было объяснить, почему волновое число (*величина, обратная длине волны*) зависит от обратных квадратов двух натуральных чисел и показать, что номер серии и номер линии, действительно есть главное квантовое число нижнего и верхнего уровней для перехода электрона в процессе излучения/поглощения кванта света. Подставив в закон сохранения энергии для этого перехода энергии Боровских орбит или состояний (*орбиталей*) в модели Шредингера, которые, в свою очередь, как раз и зависят от величины, обратной квадрату главного квантового числа, мы и получили выражение формулу Бальмера, где в позиции номера серии и номера линии стоят не абстрактные натуральные числа, а соответствующие значения главных квантовых чисел перехода.

Получив вышеприведённое решение, можем разобраться с физическим смыслом *термов*. В этом случае терм получаем из следующего соотношения:

$$\left. \begin{aligned} E_\phi &= \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{E_\phi}{hc} \\ E_\phi &= E_{n_1} - E_{n_2} \\ E_\phi &= T(n_1) - T(n_2) \end{aligned} \right\} \frac{E_{n_1}}{hc} - \frac{E_{n_2}}{hc} = T(n_1) - T(n_2),$$

$$T(n) = \frac{E_n}{hc}$$

– *терм* есть энергия уровня (*стационарного состояния*) в решении уравнения Шредингера для атома водорода либо энергия Боровской орбиты, делённая на постоянную Планка и скорость света.

4.3. Спектр атома водорода

Рассмотрим ещё раз и отдельно характерные особенности спектра излучения (*соответственно, и спектра поглощения*) атомарного водорода.

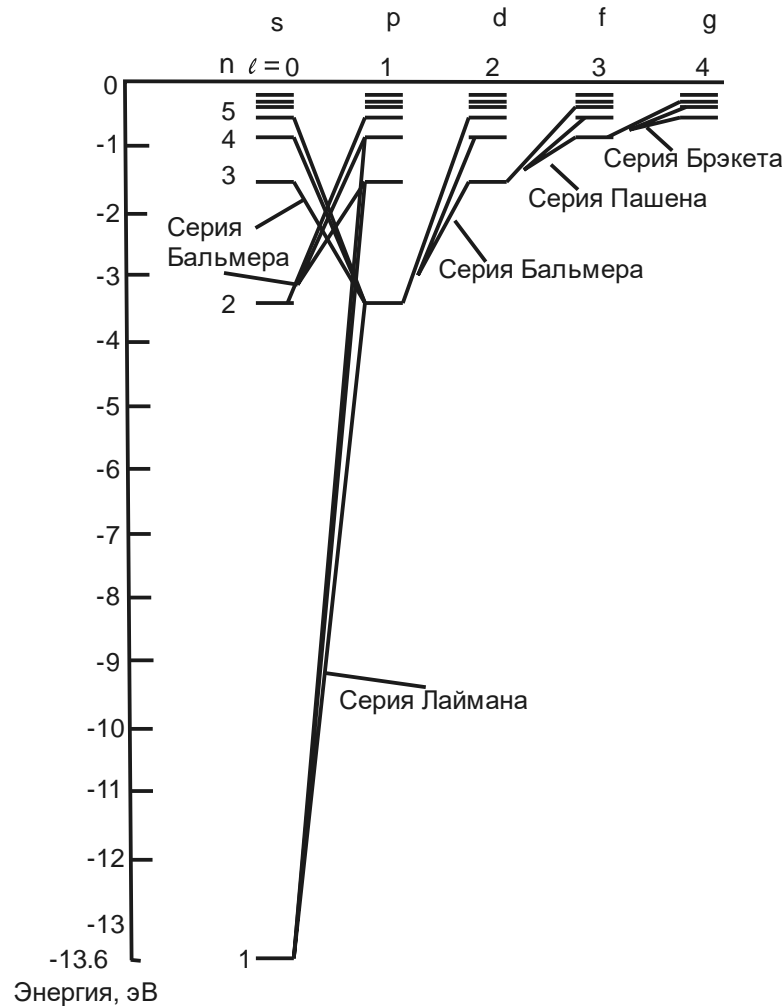


Рисунок 4.2
Спектр излучения/поглощения атомарного водорода

Выше приведена энергетическая диаграмма переходов электронов (*переходов электронов и одного состояния в другое...*), соответствующих тем или иным линиям излучения/поглощения в спектре атома водорода. Отдельно обращаем внимание, что при решении уравнения Шредингера (*как и при решении других подобных задач*) за ноль потенциальной энергии была принята энергия вакуума. Таким образом, электрон в связанном состоянии в атоме водорода находится в потенциальной яме и **его энергия ниже нуля!**

Напомним, что весь спектр атома водорода (*длины волн либо частоты, соответствующие линиям в спектре излучения/поглощения атомарного водорода*) описывается обобщённой формулой Бальмера:

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\lambda} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

либо

$$\nu = R_{\nu} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad R_{\nu} = cR_{\lambda},$$

где n_1 и n_2 – номер серии и номер линии в серии, с точки зрения рассмотрения структуры самого спектра атома водорода. Либо номер энергетического уровня на какой и с какого происходит переход электрона в момент излучения кванта света – фотона.

И так. При излучении или поглощении кванта света (*фотона*) электрон в атоме переходит из одного состояния в другое. Оба эти состояния описываются своим набором квантовых чисел и своими (*соответствующими им*) волновыми функциями

Помимо этого, при излучении и поглощении света выполняется правило отбора – при излучении или поглощении фотона орбитальное квантовое число должно измениться на единицу:

$$\Delta l = \pm 1$$

Дело в том, что спин фотона (*как бариона*) равен единице (*в постоянных Планка*). Данное правило отбора следует из выполнения закона сохранения момента импульса – при поглощении фотон должен передать куда-то этот момент импульса. При изменении орбитального квантового числа на единицу это момент импульса идёт на изменение орбитального момента импульса электрона.

Ещё отметим, что вырожденность энергетического спектра по орбитальному квантовому числу ℓ приводит к тому, что одним и тем же линиям в спектре излучения/поглощения атомарного водорода соответствуют сразу несколько переходов. И так. Серия линий Лаймана соответствует одной единственной серии переходов между уровнями и

подуровнями – на первом уровне есть в наличии лишь одна орбиталь s ($\ell=0$) и, следуя правилу отбора, с неё (или на её) можно перейти только лишь на орбиталь p ($\ell=1$). Но, вот уже серии линий в спектре атома водорода Бальмера соответствует сразу три варианта переходов:

1. $2s - 3p, 4p, 5p, \dots$
2. $2p - 3s, 4s, 5s, \dots$
3. $2p - 3d, 4d, 5d, \dots$

Для серий Пашена и Брэкета таких переходов ещё больше. Они, просто, не обозначены на схеме в целях сохранения её читабельности.

Уже для спектра излучения/поглощения атомарного лития подобного эффекта не будет – в следствии того, что начиная с лития начинается заполнение второго энергетического уровня и его электроны взаимодействуют с электронами уже заполненной первой оболочки, вырождение энергетического спектра по орбитальному квантовому числу снимается.

Литература

Основная литература

1.
 - a. Савельев И.В. Курс общей физики. В 5-ти книгах. Книга 5. Квантовая механика. — М, СПб: Лань, 2011.
 - b. [Савельев И.В. Курс общей физики. В 3-х т. Том 3. Оптика, атомная физика, физика атомного ядра и элементарных частиц — М,СПб: Лань, ~2011](#)
2. [Иродов И.Е. Квантовая физика. Основные законы. — М, СПб: Физматлит, Невский диалект, ~2014.](#)

Дополнительная литература

3.
 - a. [Сивухин Д.В. Общий курс физики. Учебное пособие в 5-и томах. Т. 5, Ч. 1. Атомная физика. — М: ..., 1980.](#)
 - b. [Сивухин Д.В. Общий курс физики. Учебное пособие в 5-и томах. Т. 5, Ч. 1. Атомная и ядерная физика. — М: ФИЗМАТЛИТ, изд-во МФТИ, 2002.](#)
4. [Савельев И.В. Основы теоретической физики. В 2-х т. Том 2. Квантовая механика — М: «Наука», 1991.](#)
5. [Мессиа А. Квантовая механика. В 2-х т. Том 1. — М: «Наука», 1991.](#)

Осташев Владимир Борисович

Учёная степень: кандидат технических наук

Учёное звание: доцент

Должность: доцент кафедры общей физики СПбГТИ(ТУ)

Личный сайт:

<http://ostashevvb.spb.ru>



Вкладки:

«*В помощь детям*» – конспекты лекций, методические материалы,
вопросы к экзамену

«*О себе*» – контактная информация

[Вернуться к содержанию...](#)

Кафедра общей физики
Квантовая механика I –
Конспект лекций

Владимир Борисович Осташев

Отпечатано с оригинал-макета Формат 60×90 $\frac{1}{16}$
Печатных листов __,__ Тираж __ экз.

Государственное образовательное учреждение высшего
профессионального образования
Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)
(СПбГТИ (ТУ))

190013, Санкт-Петербург, Московский пр., 26
Отпечатано в типографии _____, т. +7- _____

цена 0 руб. 00 коп.