



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

# ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ФИЗИКУ

САВЕЛЬЕВ-ТРОФИМОВ  
АНДРЕЙ БОРИСОВИЧ

ФИЗФАК МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН  
СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ  
ПРОФ. РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ  
СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ.  
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ  
НА [VK.COM/TEACHINMSU](https://VK.COM/TEACHINMSU).

ЕСЛИ ВЫ ОБНАРУЖИЛИ  
ОШИБКИ ИЛИ ОПЕЧАТКИ,  
ТО СООБЩИТЕ ОБ ЭТОМ,  
НАПИСАВ СООБЩЕСТВУ  
[VK.COM/TEACHINMSU](https://VK.COM/TEACHINMSU).



БЛАГОДАРИМ ЗА ПОДГОТОВКУ КОНСПЕКТА  
СТУДЕНТКУ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ  
**ГЕОРГИЕВСКУЮ ЕКАТЕРИНУ ПАВЛОВНУ**

---

# Оглавление

1	Лекция 1. Развитие квантовой физики. . . . .	6
1.1	История квантовой физики . . . . .	6
1.2	Характерные константы и размеры квантовых величин . . . . .	6
1.3	Мысленный эксперимент о разнице классической и квантовой физики . . . . .	8
1.4	Развитие квантовой физики . . . . .	13
2	Лекция 2. Абсолютно чёрное тело. . . . .	14
2.1	Абсолютно чёрное тело . . . . .	14
2.2	Формула Планка . . . . .	19
2.3	Фотоэффект . . . . .	19
2.4	Характеристики фотона . . . . .	21
3	Лекция 3. Строение атома. Постулаты Бора. . . . .	25
3.1	Эксперимент с осциллирующим зеркалом . . . . .	25
3.2	Эффект Комптона . . . . .	26
3.3	Строение атома . . . . .	28
3.4	Постулаты Бора . . . . .	31
3.5	Опыт Франка и Герца . . . . .	33
4	Лекция 4. Волновая природа материи. . . . .	35
4.1	Опыт Рамзауэра и Таунсенда . . . . .	35
4.2	Волны де Броиля . . . . .	36
4.3	Опыты Девиссона и Джермера . . . . .	38
4.4	Опыты Томпсона и Тартаковского . . . . .	40
4.5	Дифракция холодных нейтронов . . . . .	40
4.6	Наличие стационарных орбит в атоме водорода . . . . .	41
4.7	Локализация квантовой частицы . . . . .	41
4.8	Соотношение неопределенности Гейзенberга . . . . .	43
5	Лекция 5. Основы квантовой механики. . . . .	45
5.1	Волновая функция и её нормировка . . . . .	45
5.2	Средние значения физических величин . . . . .	46
5.3	Операторы физических величин . . . . .	48
5.4	Собственные значения операторов . . . . .	49

5.5	Оператор момента импульса . . . . .	51
5.6	Общая формулировка соотношения неопределённости . . . . .	53
5.7	Оператор Гамильтона . . . . .	54
6	Лекция 6. Потенциальная яма. . . . .	55
6.1	Стационарное уравнение Шредингера . . . . .	55
6.2	Нестационарное уравнение Шредингера . . . . .	56
6.3	Уравнение непрерывности . . . . .	57
6.4	Теорема Эренфеста . . . . .	58
6.5	Бесконечная потенциальная яма . . . . .	60
6.6	Потенциальная яма конечной глубины . . . . .	63
7	Лекция 7. Потенциальный барьер. . . . .	65
7.1	Потенциальная яма конечной глубины . . . . .	65
7.2	Потенциальный барьер и туннельный эффект . . . . .	69
7.3	Примеры туннельного эффекта . . . . .	71
8	Лекция 8. Движение в центральном поле. . . . .	75
8.1	Движение в центральном поле . . . . .	75
8.2	Призма Николя . . . . .	82
8.3	Квантовые числа . . . . .	83
9	Лекция 9. Магнитный момент. Спин. . . . .	85
9.1	Магнитный момент атома . . . . .	85
9.2	Опыт Штерна-Герлаха . . . . .	87
9.3	Спин электрона . . . . .	88
9.4	Опыт Эйнштейна - де Хааза . . . . .	89
9.5	Полный угловой момент . . . . .	90
9.6	Гиромагнитное отношение . . . . .	92
9.7	Принцип Паули . . . . .	94
10	Лекция 10. Молекулы. . . . .	95
10.1	Принцип Паули . . . . .	95
10.2	Периодическая система элементов . . . . .	97
10.3	Молекулы . . . . .	99
10.4	Гетерополярная связь . . . . .	99
10.5	Гомополярная связь . . . . .	102
10.6	Энергетическая структура молекул . . . . .	103
11	Лекция 11. Бозоны и фермионы. . . . .	105
11.1	Молекулы . . . . .	105
11.2	Ансамбль квантовых частиц . . . . .	106
11.3	Распределения частиц по состояниям . . . . .	109
11.4	Распределение Ферми-Дираха и Бозе-Эйнштейна . . . . .	111
11.5	Конденсат Бозе — Эйнштейна . . . . .	112

11.6	Эффекты сверхпроводимости и сверхтекучести . . . . .	113
12	Лекция 12. Теория возмущений. . . . .	114
12.1	Теория возмущений . . . . .	114
12.2	Атом водорода . . . . .	117
12.3	Атом гелия . . . . .	119
12.4	Задачи теории возмущений . . . . .	122
13	Лекция 13. Релятивистская квантовая теория. . . . .	124
13.1	Уравнение Клейна — Гордона — Фока . . . . .	124
13.2	Уравнение непрерывности и плотность вероятности для уравнения Клейна — Гордона — Фока . . . . .	125
13.3	Уравнение Дирака . . . . .	126
13.4	Формы уравнения Дирака и уравнение непрерывности . . . . .	128
13.5	Решение уравнения Дирака для электрона в центральном поле . . . . .	129
13.6	Решение уравнения Дирака для свободной частицы . . . . .	130
13.7	Античастицы . . . . .	131
13.8	Опыт Лэмба - Резерфорда . . . . .	132

# Лекция 1. Развитие квантовой физики.

## История квантовой физики

Классическая физика не описывает многие вещи. Например - в молекулярной физике - появление понятия газа Ван-дер-Ваальса. При рассмотрении течения жидкости по трубе появляются некоторые константы, описывающие свойства жидкости, в том числе вязкость. Однако, классическая физика не даёт информации о том, почему у конкретной жидкости конкретная вязкость.

Для изучения многих физических явлений необходимо от макрообъектов перейти к микрообъектам. Однако описание микрообъектов в рамках классической физики невозможно.

Более того, даже в макромире встречаются объекты, рассмотрение которых невозможно вне квантовых представлений (лазер - принципиально квантовый генератор).

## Характерные константы и размеры квантовых величин

Рассмотрим следующие фундаментальные константы:

$m_e$  - масса электрона,  $e$  - заряд электрона,  $c$  - скорость света,  $h$  - постоянная Планка.

Фундаментальные постоянные жёстко связаны со структурой материи и времени. Каждая из констант соответствует определенному взаимодействию (масса - сила тяжести, заряд - электростатические силы, скорость света - наличие релятивизма, постоянная Планка - квантовость).

Выбор констант определяет свойства системы, о которой идет речь. Например, при выборе констант  $e, m_e, h$  мы определяем систему, в которой есть электроны с зарядом и массой (есть электростатическое взаимодействие), и данную системы мы рассматриваем как квантовую.

С помощью теории размерностей можно определить характерные масштабы системы, в которой мы работаем.

Например, характерный масштаб скорости:

$$v = \frac{e^2}{h} = \frac{c}{137} \quad (1.1)$$

Если характерная скорость системы соответствует указанной величине, то систему можно считать нерелятивистской.

Для характерного масштаба системы можно записать:

$$r = \frac{h^2}{me^2} \approx 0.5 \text{ \AA} \quad (1.2)$$

Для энергии:

$$E = \frac{me^4}{h^2} \approx 30 \text{ эВ} \quad (1.3)$$

где  $1 \text{ эВ} \approx 10^{-19} \text{ Дж.}$

Для определения системы нельзя взять набор сразу из четырёх констант. В этом случае система будет переопределена (например, расстояние можно будет определить двумя способами - из двух разных наборов констант).

Попробуем взять другой набор констант:  $m_e, c, e$ .

При этом скорость останется скоростью света.

Чтобы найти характерное расстояние, приравняем энергию покоя электрона кулоновскому взаимодействию двух зарядов:

$$m_e c^2 = \frac{e^2}{r} \quad (1.4)$$

Тогда:

$$r = \frac{e^2}{m_e c^2} \quad (1.5)$$

Таким образом, мы получили масштабы, соответствующие ядерной физике.

Можно брать различные наборы фундаментальных констант, при этом для этих систем будут разные значения характерной энергии. Можно заметить, что при увеличении энергии характерный масштаб системы уменьшается (чем больше энергия частицы, тем в меньших масштабах она локализована).

Рассмотрим следующую релятивистскую систему, в которой есть гравитационное взаимодействие и квантовость (то есть мы хотим квантовать гравитационное поле). То есть данную систему можно описать константами:  $G, h, c$

Рассмотрение данной системы дает предел увеличения энергии и увеличения масштабов.

В гравитационной теории есть некий гравитационный параметр, являющийся отношением гравитационного потенциала к  $c^2$ :

$$\xi = \frac{\varphi}{c^2} \quad (1.6)$$

Гравитационный потенциал:

$$\varphi = \frac{Gm}{l} \quad (1.7)$$

где G - гравитационная постоянная, m - масса, l - характерный масштаб.

Вместо массы запишем:

$$m = \frac{E}{c^2} \quad (1.8)$$

Запишем энергию для волновой системы:

$$E = h \frac{c}{l} \quad (1.9)$$

Тогда, после подстановки:

$$\xi = \frac{Gh}{l^2 c^3} = 1 \quad (1.10)$$

Полученная величина  $\xi$  безразмерная. Приравняем её к 1 и скажем, что при выполнении данного равенства наступает квантование электромагнитного поля. (Квантование появляется, когда энергия и масса выражаются через условную частоту и длину волны)

Тогда для характерного масштаба получим:

$$l = \frac{1}{c} \sqrt{\frac{Gh}{c}} \approx 5 \cdot 10^{-33} \text{ см} \quad (1.11)$$

Полученная величина называется планковской длиной.

Теперь, зная l, можно посчитать энергию. После подстановки получим:

$$E = 3 \cdot 10^{16} \text{ ТэВ} \quad (1.12)$$

Таким образом, чтобы рассмотреть, что происходит на масштабах l, необходима указанная энергия, которая в настоящее время недостижима.

## Мысленный эксперимент о разнице классической и квантовой физики

**Пример 1.** Проведем следующий мысленный эксперимент. Пулемёт с большим углом разброса стреляет. На его пути расположена толстая стена, в которой есть небольшая

щель. Часть пуль пролетает через данную щель, и попадает в земляной вал, расположенный позади стены. Посчитаем, сколько пуль попало в единицу длины земляного вала - получим некую зависимость (плотность вероятности нахождения пули по координате  $x$ ) (см. Рис. 1.1).

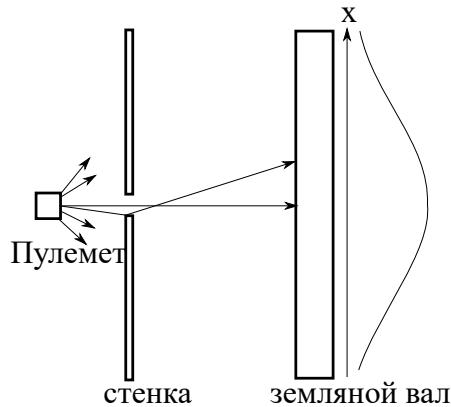


Рис. 1.1: Иллюстрация к примеру 1

Если учитывать, что пули не распадаются на части при столкновении, то полученный график будет дискретным (причем образующая этого графика будет аналогична нарисованному выше).

### Пример 2.

Рассмотрим другой эксперимент.

Поставим излучатель волн, препятствие с одной щелью и экран с детектором:

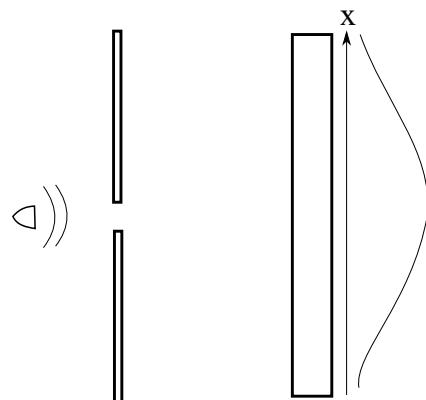


Рис. 1.2: Иллюстрация к примеру 2

В случае электромагнитных волн детектор будет измерять мощность волны, пришедшей в точку экрана. Эта мощность будет пропорциональна квадрату амплитуды испущенной волны. Если считать, что щель достаточно большая, то мы получим зависимость того же сорта, что и в предыдущем случае, однако зависимость уже будет непрерывной, а не

дискретной.

**Пример 3.** Рассмотрим эксперимент, аналогичный предыдущему, но уже с двумя щелями:

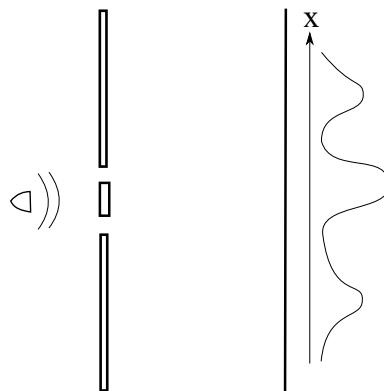


Рис. 1.3: Иллюстрация к примеру 3

В этом случае будет наблюдаться интерференция двух волн, причём

$$|A_1 + A_2|^2 = A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2e^{i\varphi} \quad (1.13)$$

где  $\varphi$  - разность фаз между  $A_1$  и  $A_2$ . ( $A_1, A_2$  - амплитуды волн).

Если аналогичный опыт провести для пуль, то полученный график будет соответствовать не интерференции, а сумме амплитуд.

**Пример 4.** Поставим источник электронов, стенку с одним отверстием, экран и детектор на нем.

Каждый раз мы будем детектировать ровно один электрон. Как следствие, график распределения электронов получится дискретным.

**Пример 5.** Аналогичный эксперимент с электронами проведём для двух щелей. В этом случае каждой щели будет соответствовать максимум, причём графики останутся дискретными (как в предыдущем примере), но при этом в области наложения двух потоков будет наблюдаться интерференция.

Таким образом, электроны, приходящие из разных отверстий, интерфеcируют друг с другом, но при этом в области интерференции мы регистрируем одиночные щелчки.

Можно ослабить яркость электронного источника. В этом случае картина будет проявляться значительно дольше, но в этом случае картина останется аналогичной предыдущей.

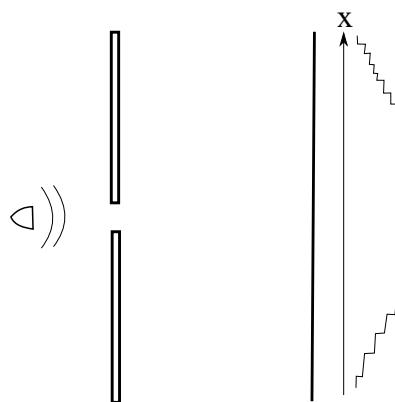


Рис. 1.4: Иллюстрация к примеру 4

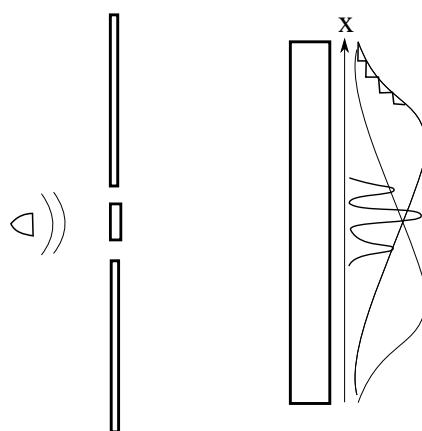


Рис. 1.5: Иллюстрация к примеру 5

**Пример 6.** Попробуем узнать, через какую именно щель проходит конкретный электрон. Для этого поставим у щелей источник электромагнитного излучения.

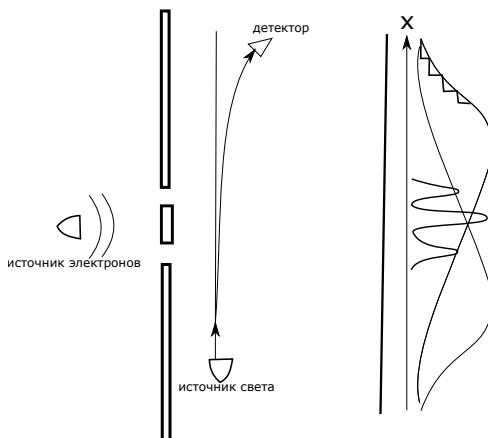


Рис. 1.6: Иллюстрация к примеру 6

Когда электрон проходит в области источника, часть фотонов рассеивается на электроне. Тогда, если электрона нет, то свет от источника проходит прямо, если электрон есть, свет от источника отражается (его можно зафиксировать детектором) (см. Рис. 1.6). Таким образом, можно определить, прошел ли электрон через щель, у которой стоит источник света, или нет. Однако в таком эксперименте интерференция исчезнет.

Усложним задачу: построим отдельно графики для замеченных (для которых была вспышка в детекторе) и незамеченных электронов. В этом случае для незамеченных электронов снова будет интерференция.

Вывод: при процедуре изменения электрона его свойства меняются. Это связано с тем, что при столкновении с фотонами, электрон теряет часть энергии, вследствие чего изменяется и сама система. Попробуем уменьшить влияние фотонов на электрон. Для этого нужно увеличить длину волны. Тогда энергия квантов будет меньше и потеря электронов на рассеянии будет меньше. При некотором значении длины волны будут и вспышки, и интерференционная картина. Однако, если мы оценим длину волны, которая используется в таком случае, она будет сравнима с расстоянием между отверстиями. А раз длина волны так велика, уже нельзя определить, где именно произошло рассеяние, то есть мы не узнаем, через какую щель прошёл электрон.

Таким образом, когда мы теряем информацию о том, что было с электроном, интерференция опять появляется.

В связи с описанным выше электрон можно рассматривать как частицу с массой и зарядом. Однако при этом необходимо приписывать электрону волновые свойства.

Общая особенность квантовых частиц - наличие корпускулярно-волнового дуализма. Любая квантовая частица обладает и свойством классической частицы, и свойствами волны. При этом любое измерение в системе принципиально меняет свойства квантовых частиц.

Волна, которая описывает электрон, в терминах квантовой физики является волной вероятности.

То есть можно записать электрон как волну:

$$Ae^{i\varphi} \quad (1.14)$$

Измеримой величиной будет  $|A|^2$ , фаза исчезает при измерении.

А величина  $|A|^2$  даёт плотность распределения вероятности электрона в пространстве. В соответствии с ней мы будем получать с некоторой вероятностью регистрацию электрона

в точке. При этом всегда будет регистрироваться целый неделимый электрон.

Имеет место принцип дополнительности: если некоторая теория не противоречит установленным экспериментальным фактам, то любая следующая теория должна старую теорию как следствие.

Взаимодействие квантовой и классической теории состоит в принципе дополнительности. Классическая физика допустима в определённых пределах.

## Развитие квантовой физики

- 1900 год - работа Планка по изучению абсолютно чёрного тела
- 1905 год - законы фотоэффекта
- 1913 год - сформулированная Бором теория атома

В случае каждого события была введена новая константа - постоянная Планка.

- 1923 год - введение понятия волны де Бройля
- 1927 год - эксперимент по дифракции электрона
- 1926 год - получены уравнения Шрёдингера и Гейзенберга, которые дали первый математический аппарат описания квантовых частиц; сформулировано вероятностное описание частиц (волна вероятности)
- 1927 год - соотношение неопределённости Гейзенберга
- 1926 год - Дирак предложил квантование электромагнитного поля
- 1928 год - уравнение Дирака (релятивистское уравнение для квантовой частицы)
- 1932 год - наблюдение позитронов
- 1934 год - квантовая теория бета-распада

## Лекция 2. Абсолютно чёрное тело.

### Абсолютно чёрное тело

Любое нагретое тело излучает. Абсолютно чёрное тело - модель излучающего тела. Одно из представлений следующее. Полость в термодинамическом равновесии с термостатом температуры  $T$ . То, что происходит в полости, находится в термодинамическом равновесии с окружающим пространством, то есть стенки этой полости излучают и они же поглощают.

Экспериментально излучение абсолютно чёрного тела можно получить следующим образом. Представим двойную сферическую оболочку. Внешняя оболочка достаточно толстая и находится при постоянной температуре. Можно просверлить маленькое отверстие, такое, что потери через это отверстие пренебрежимо малы по сравнению с тем, что происходит внутри полости. Тогда то, что будет светить из отверстия, будет близко к излучению абсолютно твёрдого тела.

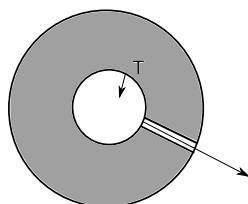


Рис. 2.1: Модель абсолютно чёрного тела

Спектр излучения абсолютно твёрдого тела - зависимость яркости излучения  $F$  от частоты  $\nu$  или длины волны.

Экспериментальная зависимость выглядит следующим образом:

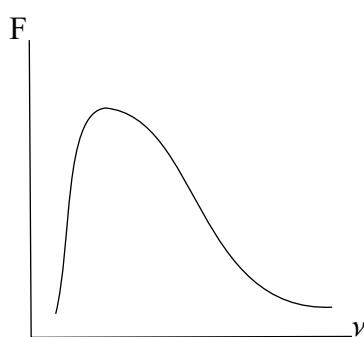


Рис. 2.2: Спектр абсолютно твёрдого тела

Однако классическая теория утверждает, что при увеличении частоты (и увеличении числа степеней свободы) энергия излучения должна расти, так как на одну степень свободы приходится энергия  $kT$ . Однако, если это так, то излучение абсолютно чёрного тела

содержит бесконечно много энергии.

Учитывая закон Больцмана считая его распределением плотности вероятности для энергии, получим:

$$\int_0^{\infty} A e^{-\frac{E}{kT}} dE = 1 \quad (2.1)$$

где А - нормировочная константа.

Тогда

$$A = \frac{1}{kT} \quad (2.2)$$

Далее, если распределение Больцмана соответствует термодинамически равновесному состоянию, то средняя энергия будет равна  $kT$  в классическом случае (получено после расчёта следующего интеграла):

$$\langle E \rangle = A \int_0^{\infty} E e^{-\frac{E}{kT}} dE = kT \quad (2.3)$$

Найдём плотность распределения степеней свободы по частоте. Для этого рассмотрим чёрное тело как ящик с зеркальными стенками. Для такой системы всё излучение будет содержаться внутри этого ящика.

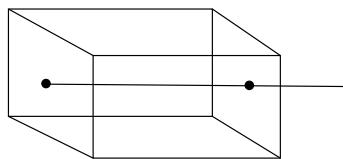


Рис. 2.3: Иллюстрация для расчёта

Для такого ящика можно посчитать число степеней свободы. Если есть некая частота  $\nu$ , то число степеней свободы для этой системы с энергией, меньшей энергии моды на данной частоте - это полное число возможных конфигураций электромагнитного поля внутри системы, у которых частота меньше  $\nu$ .

Ящик зеркальный, значит, по определению, на любой его поверхности должен быть ноль электромагнитного поля (узел электромагнитного поля). Соответственно, моды такой системы - стоячие электромагнитные волны с узлами на всех поверхностях.

Возьмём одну координату и посчитаем число стоячих волн:

$$\frac{l}{\lambda/2} = N \quad (2.4)$$

Соответственно, полное число стоячих волн вдоль одной координаты:

$$N = \frac{2l\nu}{c} \quad (2.5)$$

Однако, система является трёхмерной. Значит, нужно взять волновой вектор какой-то моды:

$$\vec{k} = \vec{k}_x + \vec{k}_y + \vec{k}_z \quad (2.6)$$

Причём по каждой из координат должна быть стоячая волна. То есть (в случае, если ящик является кубом)

$$k_{x,y,z} = \frac{\pi n_{x,y,z}}{l} \quad (2.7)$$

Получаем три числа, которые и описывают моду.

При этом

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \quad (2.8)$$

Введём число  $m$ :

$$m^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \quad (2.9)$$

Таким образом, мы перешли из координатного пространства в другое трёхмерное пространство, где координатами являются  $k_x, k_y, k_z$  (или  $n_x, n_y, n_z$ ).

В этом пространстве каждая возможная мода, которая соответствует стоячей волне в ящике, соответствует некоторой точке в новом пространстве с некоторыми координатами. При этом число  $m$  ( $m$  соответствует максимальной частоте  $\nu$ ) в новом пространстве даёт сферу.

Внутри данной сферы будет множество узлов с целочисленными координатами. Это будут те моды, для которых  $\nu \leq \nu_0$ . (то есть берем все узлы системы, которые находятся внутри сферы радиуса  $m$ ).

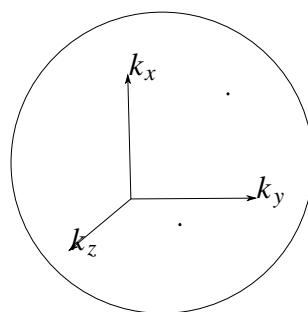


Рис. 2.4: Сфера в пространстве волновых векторов

Рассмотрим случай большого радиуса сферы:  $m \gg 1$ .

Тогда число узлов, которые попадут на поверхность сферы, будет гораздо меньше числа

узлов в объеме сферы.

Тогда число узлов, у которых частоты моды меньше  $\nu$ , равна объему сферы (после второго знака равенства там расписано через частоту):

$$N(\nu) = \frac{4\pi}{3}m^3 = \frac{4\pi}{3}\frac{\nu^3V}{c^3} \quad (2.10)$$

где  $V$  - объем куба.

Необходимо учесть, что для любой стоячей волны могут быть два типа волн, так как у электромагнитных волн существует поляризация (и два состояния поляризации. То есть в предыдущую формулу нужно добавить множитель 2.

$$N(\nu) = 2\frac{4\pi}{3}m^3 = 2\frac{4\pi}{3}\frac{\nu^3V}{c^3} \quad (2.11)$$

Устремим объем к бесконечности и посчитаем число мод на единицу объема:

$$dN = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}d\nu \quad (2.12)$$

При переходе к классическим представлениям для энергии на единичный интервал получим

$$dE = dN \cdot kT = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT d\nu \quad (2.13)$$

Данная формула хорошо описывает указанный выше спектра излучения при малых частотах. Однако при больших частотах получаем "ультрафиолетовую катастрофу": при стремлении частоты излучения  $\nu$  энергия в единичный спектральный интервал тоже стремится к бесконечности. (то есть классическая теория не может описывать излучение абсолютно чёрного тела).

Позже Планком была получена формула:

$$u(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad (2.14)$$

Данная формула хорошо аппроксимирует экспериментальные данные.

Эйнштейн предположил, что энергия не может меняться непрерывно, что есть некоторый минимальный квант энергии:

$$\varepsilon_0 = \hbar\omega_0 \quad (2.15)$$

При этом любая другая частота:

$$\omega_n = n\omega_0 \quad (2.16)$$

Вместо непрерывной шкалы энергий возникает дискретная.

Тогда распределение Больцмана можно записать как дискретное распределение:

$$P(n) = Ce^{-n\frac{\varepsilon_0}{kT}} = Ce^{-n\varkappa} \quad (2.17)$$

где  $\varkappa = \frac{\varepsilon_0}{kT}$ .

Посчитаем среднюю энергию:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum P(n) \cdot E_n}{\sum P(n)} \quad (2.18)$$

Для случая нормировки:

$$\sum P(n) = 1 \quad (2.19)$$

Учитывая, что под суммой будет стоять геометрическая прогрессия, из нормировки получим:

$$C^{-1} = \frac{1}{1 - e^{-\varkappa}} \quad (2.20)$$

Тогда средняя энергия

$$\langle E \rangle = kT \sum_0^{\infty} c \cdot n \varkappa e^{-n\varkappa} \quad (2.21)$$

Учтём, что  $-\frac{\partial \sum e^{-n\varkappa}}{\partial \varkappa} = n \sum e^{-n\varkappa}$ .

В итоге получим

$$\langle E \rangle = \frac{\varepsilon_0}{e^{\frac{\varepsilon_0}{kT}} - 1} \quad (2.22)$$

При обратном переходе к непрерывной шкале  $\varepsilon_0 \rightarrow 0$ . Тогда полученная формула сводится к классической:  $\langle E \rangle = kT$ .

Стенки полости излучают не любую частоту, а некие дискретные параметры. То есть можно говорить, что стенки состоят из осцилляторов, которые излучают определенными порциями - квантами. При этом минимальная порция равна  $\varepsilon_0 = \hbar\omega_0$ . Таким образом, мы ввели систему энергетических уровней (см. Рис fig:2.5).

Представим, что излучатель помещён в термостат температуры T. Тогда в системе уровней будет уровень kT (обозначен на Рис. 2.5). С точки зрения распределения Больцмана это означает, что заселённость уровней ниже kT будет велика, а населённость уровней выше kT начинает падать. Например, если система попала на какой-то уровень выше kT, то для того, чтобы перейти на следующий уровень, системе нужен некий скачок. Если бы спектр был бы непрерывным, система могла бы диффундировать по уровням вверх (в

классике средняя энергия на каждую моду равна  $kT$ ). Вероятность населённости уровня тем меньше, чем больше энергия уровня превышает  $kT$ .

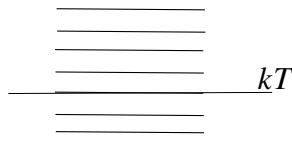


Рис. 2.5: Система энергетических уровней

Например, если  $\varepsilon_0 \gg kT$ , то  $\langle E \rangle = \varepsilon_0 e^{-\frac{\varepsilon_0}{kT}}$ . То есть средняя энергия уменьшается с ростом  $\varepsilon_0$ .

## Формула Планка

Формула Планка содержит две фундаментальные константы - константу Больцмана  $k$  и постоянную Планка  $\hbar$ . Изменяя эти константы и исследуя набор зависимостей спектральной плотности мощности от длины волны, можно тем самым измерить данные константы.

Возьмем число Авогадро:

$$N_a = \frac{R}{k} \quad (2.23)$$

$R$  можно взять непосредственно из термодинамических измерений, а  $k$  - из аппроксимации по формуле Планка.

Возьмём постоянную Фарадея ( $e$  - заряд электрона):

$$F = N_a \cdot e \quad (2.24)$$

Постоянную Фарадея можно получить из законов электролиза,  $N_a$  - из аппроксимации формулы Планка (по предыдущей формуле).

Таким образом, можно оценить заряд электрона (оценка, полученная Планком, была довольно точна).

## Фотоэффект

Рассмотрим запаянную колбу, внутри которой вакуум. Внутри неё находятся катод и анод, к которым приложено напряжение  $V$ . Будем освещать катод излучением с различными длинами волн и различной интенсивностью и измерять ток в цепи.

В этом случае будет наблюдаться выполнение законов фотоэффекта:

1. Число электронов (ток) пропорционально интенсивности света

2. Энергия электронов не зависит от интенсивности света, а зависит от длины волны и материала катода
3. Существует красная граница фотоэффекта (если длина волны больше некоторой определённой величины, а частота - меньше определённого порога, то фотоэффект не наблюдается)
4. Электроны появляются мгновенно (с точки зрения допустимого временного разрешения)

Рассмотрим простейшую модель, описывающую данный эффект (классическая модель). пусть есть электрон в поле плоской электромагнитной волны напряжённостью  $E_0$ . Для него можно записать уравнение движения:

$$m\ddot{x} = eE_0e^{i\omega_0 t} \quad (2.25)$$

Решение:

$$\dot{x} = \frac{eE_0}{m\omega_0} e^{i(\omega_0 t + \pi/2)} \quad (2.26)$$

Посчитаем среднюю энергию такого уравнения:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{m < |\dot{x}|^2 >}{2} = \frac{e^2 E_0^2}{m \omega_0^2} \quad (2.27)$$

Квадрат напряжённости пропорционален интенсивности излучения:  $E_0^2 \propto I$ .

Тогда энергия выбиваемых электронов пропорциональна интенсивности. Но тогда чем больше интенсивность, тем больше средняя энергия электронов (противоречие со втором законом фотоэффекта).

Также энергия электронов обратно пропорциональна  $\omega_0^2$ , соответственно, чем более длинноволновое излучение используется, тем больше энергия электронов (в эксперименте наблюдается обратное).

Эйнштейн вывел формулу:

$$\hbar\omega = A + K \quad (2.28)$$

где  $\hbar\omega$  - энергия фотона, А - работа выхода (энергия, которую электрон должен потерять, чтобы вылететь из металла), К - кинетическая энергия свободного электрона, который регистрируется.

Данная формула объясняет законы фотоэффекта. Число электронов будет пропорционально интенсивности, так как отношение интенсивности к энергии фотона будет равно числу квантов света, которые падают на систему. Кинетическая энергия не зависит от

интенсивности света. При этом, если положить  $K = 0$ , то формула

$$\hbar\omega = A \quad (2.29)$$

определит красную границу фотоэффекта (если  $\hbar\omega < A$ , то кинетическая энергия отрицательна, значит, электроны вылететь не могут.)

При данном рассмотрении предполагается, что в определённых условиях свет следует рассматривать как поток корпускул.

## Характеристики фотона

Если рассматривать фотон как частицу, то можно говорить о его импульсе.

Если есть некая поверхность, то давление света равно плотности электромагнитной энергии около этой поверхности:  $P = W$  ( $W$  - плотность электромагнитной энергии).

С точки зрения корпускулярной теории давление света можно записать:

$$P = \frac{W}{\hbar\omega} c \cdot p = W \quad (2.30)$$

где  $\frac{W}{\hbar\omega}$  - число фотонов, которые падают на поверхность,  $c$  - скорость света,  $\frac{W}{\hbar\omega} \cdot c$  - поток фотонов в единицу времени. Каждый фотон передаёт импульс  $p$ . Тогда поток фотонов передаёт импульс  $P$ .

Тогда импульс фотона связан с волновым вектором как

$$p = \hbar k \quad (2.31)$$

Энергия фотона:  $E = \hbar\omega$ .

Фотон является релятивистской частицей, значит, квадрат её полной энергии

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (2.32)$$

где  $m$  - масса покоя.

Подставим в эту формулу выражения для энергии и импульса:

$$\hbar^2 \omega^2 = \hbar^2 k^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (2.33)$$

Тогда  $m^2 c^4 = 0$ . То есть масса фотона равна нулю.

Скорость фотона можно измерить. Массу фотона можно оценить сверху. Для этого проводят следующее. На Земле устанавливают два излучателя (с длинами волн  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ ). Один из них - оптический излучатель ( $\lambda_2 = 0,5\text{мкм}$ ), а второй - СВЧ ( $\lambda_1 = 20\text{см}$ ). Эти два

сигнала посылаются одновременно на луну, они отражаются от луны и регистрируются на земле. Измеряется задержка распространения излучения до луны и обратно.

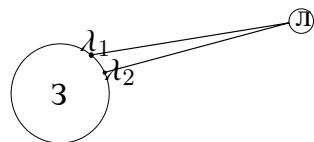


Рис. 2.6: Иллюстрация к эксперименту

По сути данный эксперимент является рассмотрением формулы

$$\hbar^2 \omega^2 = \hbar^2 k^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (2.34)$$

в случае, если скорость распространения электромагнитного излучения немного отлична от константы  $c$ . Пусть это так. Тогда возникает дисперсия - зависимость  $k$  от  $\omega$ :

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \quad (2.35)$$

В случае, если масса фотона равна нулю, то фазовая скорость  $v_\varphi = \frac{\omega}{k} = c$ .

В случае, если масса фотона не равна нулю, фазовая скорость будет представлять сложную зависимость от частоты.

То есть, измеряя задержку распространения сигнала, можно оценить, если дисперсия, или нет.

В результате проведения такого эксперимента было получено, что масса фотона меньше, чем  $10^{-44}$  кг.

У фотона есть спин. Два состояния поляризации соответствуют двум возможным состояниям проекции спина фотона.

Некоторые эксперименты позволяют говорить о неделимости фотона.

*Опыт Боме.* С помощью излучателя через узкий коллиматор излучаем металлическую фольгу (при этом поток является слабым). Когда квант рентгеновского излучения попадает в фольгу, он производит ионизацию внутренней оболочки атома. При заполнении этой оболочки обратно излучается квант рентгеновского излучения. Устанавливается два детектора рентгеновских квантов. В таком опыте срабатывает только один детектор, что позволяет говорить о неделимости фотона.

Другой эксперимент: на пути лазерного электромагнитного излучения поставим делиль, который половину пучка пропускает, половину - отражает. На путях отражённого и прошедшего пучков ставятся детекторы. После чего ослабляем пучок (одиночные фото-

ны).

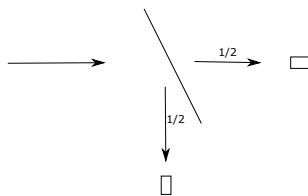


Рис. 2.7: Иллюстрация к эксперименту

Всегда будет срабатывать только один детектор.

Оценим размер фотона. Рассмотрим зеркало, на которое падает поток фотонов. Пусть зеркало движется со скоростью  $v \ll c$ . Каков будет спектр отражённых фотонов?

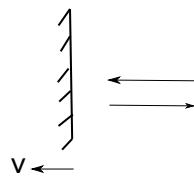


Рис. 2.8: Иллюстрация к эксперименту

В рамках волновой теории будет происходить эффект Доплера:

$$\omega = \frac{\omega_0}{1 + v/c} \quad (2.36)$$

То есть частота отражённых от зеркала фотонов будет много меньше частоты падающих. С точки зрения корпускулярной теории запишем законы сохранения:

$$p + Mv = -p' + Mv' \quad (2.37)$$

$$E + \frac{Mv^2}{2} = E' + \frac{Mv'^2}{2} \quad (2.38)$$

Данную систему можно разрешить относительно частоты. Далее, устремляя массу зеркала к нулю, получим формулу эффекта Доплера. Значит, электромагнитная и корпускулярная теория дают одинаковый результат.

Рассмотрим случай колеблющегося зеркала:

$$v = v_0 \sin \Omega t \quad (2.39)$$

Причём  $v_0 \ll c$ ,  $\Omega \ll \omega$ .

С точки зрения корпускулярной теории, момент соударения фотона с зеркалом очень мал. Тогда возьмём мгновенную скорость зеркала и перейдем к предыдущей задаче. Тогда произойдёт эффект Доплера, но при этом частота отражённого фотона начнет зависеть от времени:

$$\frac{\omega_0}{1 + \frac{v_0 \sin \Omega t}{c}}$$

.

## Лекция 3. Строение атома. Постулаты Бора.

### Эксперимент с осциллирующим зеркалом

Рассмотрим эксперимент с колеблющимся зеркалом (конец прошлой лекции) с точки зрения волновой теории. Введём комплексный коэффициент отражения  $r$ :

$$r = r_0 e^{i\varphi} \quad (3.1)$$

где  $\varphi$  - изменение фазы при отражении. Тогда можно показать, что при осцилляции зеркала

$$r = r_0 e^{i\varphi} = r_0 e^{i \frac{v_0}{c} \sin \Omega t} \quad (3.2)$$

Тогда отраженное поле

$$E' = E \cdot r = E_0 r_0 e^{i(\omega_0 t + \frac{v_0}{c} \sin \Omega t)} \quad (3.3)$$

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} \simeq 10^{-15} \quad (3.4)$$

Воспользуемся тем, что

$$e^{iasin\Omega t} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} J_m(a) e^{i\Omega t} \quad (3.5)$$

где  $J_m$  - функции Бесселя.

Тогда

$$E' = E_0 r_0 \sum J_m(a) e^{i(\omega_0 + m\Omega)t} \quad (3.6)$$

Таким образом, волновая и корпускулярная теории дают разные результаты, причем правильный ответ дает электромагнитная теория (в сравнении с экспериментом).

Это связано с тем, что в классическом рассмотрении мы предположили, что фотон не имеет размера и отражается от зеркала мгновенно. Если фотон отражается долго, то скорость меняется в процессе отражения.

У фотона есть размер. Он характеризует скорее время взаимодействия с объектом, чем геометрический размер. Это связано с тем, что спектр сигнала и временная форма сигнала связаны преобразованием Фурье. Соответственно, если спектр излучения достаточно узкий, то область определения сигнала - это  $\pm\infty$  (как только мы пытаемся ввести ограничение по времени измерения электромагнитной волны, получаем расплывание спектра). Фотон имеет некоторую длину, соответствующую времени взаимодействия.

Рассмотрим условие когерентности - разность хода двух плеч одного излучения должна быть меньше длины когерентности (когда излучение осциллирует в одной и той же фазе). Для лампочки или Солнца время когерентности очень мало. Для лазерного излучения длина когерентности возрастает.

Здесь речь шла о продольном размере фотона (вдоль оси распространения излучения). Для случая поперечного размера также как

$$\Delta\tau \cdot \Delta\nu \approx 1 \quad (3.7)$$

где  $\Delta\tau$  - длина фотона (продольная когерентность),  $\Delta\nu$  - спектральная ширина точно так же

$$\Delta r \cdot \Delta k \approx 2\pi \quad (3.8)$$

где  $\Delta k$  - ширина углового спектра излучения,  $\Delta r$  - размер условного фотона (радиус когерентности).

Соответственно, если мы хотим плоскую волну (один волновой вектор). Тогда  $\Delta k = 0$ , а  $\Delta r = \infty$ . То есть плоская монохроматическая электромагнитная волна заполняет всё пространство.

## Эффект Комптона

Установлены источник рентгеновского излучения и тонкая металлическая фольга, в которой есть свободные электроны. Рассмотрим рассеяние рентгеновского излучения на электронах.

Классическая электромагнитная теория утверждает, что под действием электромагнитного поля начнёт осциллировать, причём частота осцилляций будет совпадать с частотой осцилляций поля. Заряд движущийся, значит, он будет излучать (на той же частоте, с которой воздействует поле). При этом в спектре излучения ничего нового не появится - длина волны будет той же.

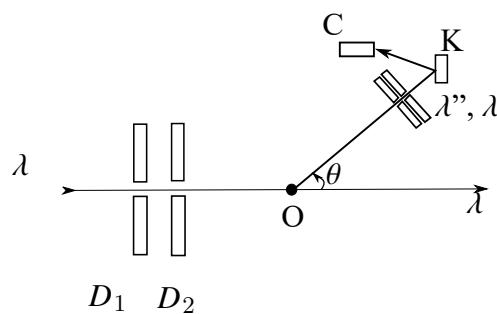


Рис. 3.1: Эффект Комптона

К - кристалл, который позволяет за счёт дифракции рентгеновских лучей измерять спектр излучения, коллиматор выделяет угол  $\theta$  из рассеянного излучения, С - детектор, измеряющий спектр.

Комптон получил результаты, не согласующиеся с классической теорией - появилась сдвигнутая по длине волны компонента, причём сдвиг всегда происходил с сторону больших

длин волн. Этот сдвиг зависел от угла наблюдения.

Рассмотрим рассеяние фотона на электроне как рассеяние двух соударяющихся частиц:

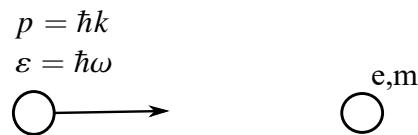


Рис. 3.2: Эффект Комптона

Запишем законы сохранения импульса и энергии:

$$\hbar k - \hbar k' = p \quad (3.9)$$

При этом учтём, что закон сохранения энергии нужно писать в релятивистской форме:

$$\hbar\omega + mc^2 - \hbar\omega' = E \quad (3.10)$$

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (3.11)$$

Возведём уравнения (3.9) и (3.10) в квадрат:

$$(\hbar k - \hbar k')^2 = p^2 \quad (3.12)$$

$$\frac{1}{c^2} (\hbar\omega + mc^2 - \hbar\omega')^2 = \frac{E^2}{c^2} \quad (3.13)$$

Теперь вычтем из (3.13) (3.12) и учтём, что  $k = \frac{\omega}{c}$ .

Тогда получится

$$\frac{\hbar\omega}{mc^2} (1 - \cos\theta) \omega' + \omega' = \omega \quad (3.14)$$

где  $\theta$  - угол между направлениями  $k$  и  $k'$ .

Тогда частота рассеянной компоненты

$$\omega' = \frac{\omega}{1 + \frac{\hbar\omega}{mc^2} (1 - \cos\theta)} \quad (3.15)$$

Перейдём к длинам волн:  $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$ ,  $\lambda' = \frac{2\pi c}{\omega'}$

$$\lambda' = \lambda + \frac{h}{mc} (1 - \cos\theta) \quad (3.16)$$

где  $\Lambda_c$  - комптоновская длина волны электрона:

$$\Lambda_c = \frac{h}{mc} \quad (3.17)$$

$$\lambda' = \lambda + \Lambda_c(1 - \cos\theta) \quad (3.18)$$

Таким образом, длина волны рассеянного излучения всегда больше  $\lambda$ .

Данный эксперимент доказывает существование фотона.

## Строение атома

**Модель Томсона** - есть электронейтральное образование, которое представляет собой электроны, расположенные в положительной субстанции.

Однако такая модель противоречит даже электромагнитной теории, так как система (если электроны не движутся) будет нестабильна.

Модель можно улучшить, если предположить, что каждый электрон осциллирует. Тогда система будет стабильна. Однако, гармонический осциллятор в виде заряженной частицы должен излучать. Расчет показывает, что тогда атом за очень короткое время излучит всю свою энергию.

Более того, если учесть, что осциллятор не гармонический, а ангармонический, анализ уравнения показывает, что электрон начнет излучать гармоники спектра:  $\omega_0, n\omega_0$ , то есть спектр излучения атома - эквидистантный спектр частот, что не подтверждается экспериментами.

Бальмер в видимой части спектра атома водорода выделил видимую часть спектра - серию Бальмера:

$$\omega_{n_2} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (3.19)$$

То есть частоты расположены не эквидистантно.

В ультрафиолетовом диапазоне обнаружена серия Лаймана:

$$\omega_{n_1} = R \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (3.20)$$

Серия Пашена:

$$\omega_{n_3} = R \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (3.21)$$

Позже Ритц ввел понятие терма:

$$T_n = \frac{R}{n^2} \quad (3.22)$$

Правило Ритца: любая частота, излучаемая атомом водорода, есть комбинация двух термов:

$$\omega_{n,m} = R \left| \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \right| \quad (3.23)$$

Для щелочных атомов будет похожее правило, но появится поправка:

$$T_n = \frac{R}{(n + \alpha)^2} \quad (3.24)$$

**Модель Резерфорда** основана на следующем эксперименте.

Пучок альфа-частиц облучает мишень из лёгкого материала и исследуется спектр рассеяния электронов (число электронов на единицу телесного угла в зависимости от угла рассеяния  $\varphi$ ).

Альфа-частицы  $m_1, Z_1 e$  рассеиваются на тяжелом силовом центре  $m_2, Z_2 e$ . Рассмотрим задачу рассеяния частицы на кулоновском потенциале рассеивающего центра:

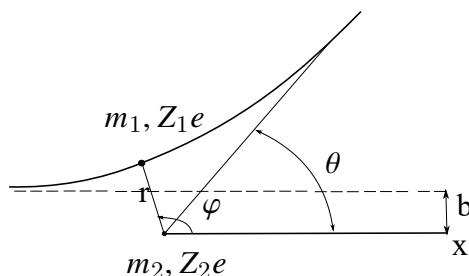


Рис. 3.3: Рассеяние альфа-частиц

где  $b$  - прицельный параметр (минимальное расстояние между направлением исходного движения частицы и центром),  $\theta$  - угол рассеяния.

Запишем закон сохранения энергии:

$$\frac{m_1}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + \frac{z_1 z_2}{4\pi\epsilon_0 r}e^2 = W \quad (3.25)$$

где  $W$  - некоторая константа, которая возникает из-за того, что рассеяние упругое, то есть энергия частицы не меняется.

Запишем закон сохранения момента импульса:

$$-mr^2\dot{\varphi} = M \quad (3.26)$$

Ведем параметр:

$$\rho = \frac{1}{r} \quad (3.27)$$

Тогда

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = \frac{d}{d\varphi} \left( \frac{1}{\rho} \right) \dot{\varphi} = \frac{M}{m} \frac{d\rho}{d\varphi} \quad (3.28)$$

$$\left(\frac{d\rho}{d\varphi}\right)^2 = -\frac{2m_1W}{M} - 2\frac{z_1z_2e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{m_1}{M^2}\rho - \rho^2 \quad (3.29)$$

Продифференцируем левую и правую часть еще раз по  $\varphi$ :

$$\frac{d^2\rho}{d\varphi^2} + \rho = -\frac{z_1z_2e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{m_1}{M^2} = C \quad (3.30)$$

Решение:

$$\rho = C + A\cos\varphi + B\sin\varphi \quad (3.31)$$

Таким образом, задача сводится к нахождению коэффициентов А и В. Они определяются из граничных условий.

Пусть

$$\varphi \rightarrow \pi \quad (3.32)$$

Тогда

$$0 = C - A \Rightarrow A = C \quad (3.33)$$

и

$$r\sin\varphi \rightarrow b \Rightarrow B = 1/b \quad (3.34)$$

Соответственно

$$\frac{1}{r\sin\varphi} = C \cdot \operatorname{ctg}\frac{\varphi}{2} + \frac{1}{b} \quad (3.35)$$

Пусть

$$\varphi \rightarrow \theta \quad (3.36)$$

Тогда при подстановке получим формулу для угла рассеяния:

$$\operatorname{ctg}\frac{\theta}{2} = -\frac{1}{bc} \quad (3.37)$$

Таким образом, угол рассеяния зависит от прицельного параметра.

Введём понятие дифференциального сечения рассеяния:

$$d\sigma = 2\pi b db \quad (3.38)$$

Выражая прицельный параметр из (3.37) и учитывая соотношение между полным телесным углом и углом рассеяния, можно получить выражение для полного числа частиц, попавших в телесный угол:

$$d\sigma = \frac{1}{4} \left( \frac{z_1z_2e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_1 v^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (3.39)$$

Анализируя  $d\sigma$ , Резерфорд установил, что элементы в таблице Менделеева расположены

в соответствии с возрастанием заряда ядра.

Также было установлено, угол рассеяния сильно зависит от прицельного параметра. При этом, измеряя максимальный угол рассеяния, можно оценить максимальное  $b$ , которое ему соответствует, и тем самым оценить радиус атома. В результате эксперимента наблюдались частицы, летящие назад от мишени. Это возможно только если заряд сосредоточен в очень маленькой области, что противоречило модели Томсона. Таким образом была построена планетарная модель атома: в атоме расположено маленькое ядро, вокруг которого по окружностям движутся электроны. Противоречия с опытами такая модель не вызывает, но при этом остаются все остальные противоречия, присущие модели Томсона. Если электроны движутся по круговым орбитам, они излучают гармоники обратного периода обращения вокруг ядра, то есть теряют энергию.

Оценим время жизни электрона.

Запишем уравнение движения:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \quad (3.40)$$

Полная энергия электрона:

$$E = K + V = \frac{e^2}{2r} \quad (3.41)$$

Запишем:

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{e^2}{2r^2} \frac{dr}{dt} \quad (3.42)$$

Электромагнитная теория Максвелла даёт теорию о том, как излучает электрон (мощность излучаемая движущимся электроном):

$$\frac{dE}{dt} = \frac{2e^2}{3c^3} a^2 \quad (3.43)$$

где  $a$  - ускорение.

Из (3.40) и (3.43) получим

$$-r^2 dr = \frac{4}{3} \frac{e^4}{m^2 c^3} dt \quad (3.44)$$

Интегрируя, можно посчитать время жизни - время, за которое в два раза уменьшится энергия электрона:

$$\tau = \frac{m^2 c^3 r_0^3}{4 e^4} \simeq 10^{-11} c \quad (3.45)$$

## Постулаты Бора

Никольсон ввёл идею квантования момента импульса для высоколежащих орбитах:

$$M = n\hbar \quad (3.46)$$

Позже были сформулированы **постулаты Бора**:

1. Атом может находиться в стационарном состоянии - существуют стационарные орбиты
2. Стационарные орбиты описываются правилом

$$M = n\hbar \quad (3.47)$$

3. На стационарных орbitах электроны могут находиться достаточно долго и не излучают. Излучение происходит при переходе с одной стационарной орбиты на другую.

Запишем

$$\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{m_0 v^2}{r} \quad (3.48)$$

Чтобы получить стационарные орбиты, запишем

$$mv r = n\hbar \quad (3.49)$$

Эта система уравнений даёт полную информацию о стационарных орбитах:

$$r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{n^2}{Z} \quad (3.50)$$

Энергия электрона на  $n$ -й орбите:

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{R}{n^2} \quad (3.51)$$

где  $R = \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2}$  - постоянная Ридберга

По сути это и будут термы Ритца.

Таким образом, введение стационарных орбит даёт термы. А третий постулат Бора (электрон излучает при переходе с одной орбиты на другую) подразумевает, что энергия излучаемого кванта равна разности энергий двух состояний:

$$\hbar\omega_{n,m} = R \left| \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \right| \quad (3.52)$$

где  $n$  - состояние, в которое переходит электрона,  $m$  - состояние, из которого переходит электрон.

Полученная модель описывает спектры атома водорода.

Однако даже для атома водорода модель неидеальна, так как она не учитывает движение ядра (то есть система электрон - ядро вращается относительно центра тяжести всей системы). При более детальном рассмотрении получаем, что в уравнения для энергии и

расстояния нужно вместо массы  $m$  ставить приведённую массу:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (3.53)$$

где  $m_1$  - масса электрона,  $m_2$  - масса протона.

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{R}{n^2} \quad (3.54)$$

Тогда радиус  $r$  будет расстоянием между центром тяжести и электроном (а не расстоянием между электроном и ядром)

$$r_n = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \frac{n^2}{Z} \quad (3.55)$$

Однако, если учесть, что масса электрона значительно меньше массы протона, получим, что  $\mu \approx m_1$ . То есть учёт описанного выше явления даёт малую поправку.

Данная модель описывает систему - ядро и один электрон. То есть такая модель может также описать ион атома гелия ( $Z=2$ ) (для атома гелия уже не верно).

## Опыт Франка и Герца

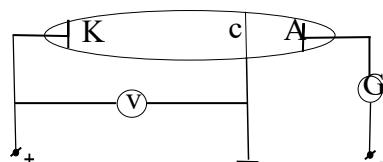


Рис. 3.4: Опыт Франка и Герца

Внутри запаянной колбы - пары ртути. У колбы есть три электрода - катод, анод и сетка. Между катодом и анодом приложено напряжение, которое мы можем менять. Сетка находится под некоторым потенциалом. Измеряется напряжение между катодом и сеткой и ток через анод.

Электроны высекаются из катода. В результате регистрируется ток в зависимости от напряжения. Зависимость имеет существенно немонотонную зависимость:

Если разность потенциалов между катодом и анодом положительна, то электроны начинают ускоряться. Электроны достигают анода и регистрируется ток. При этом при увеличении напряжения ток растёт. Однако при некотором напряжении электрон набирает вблизи сетки энергию порядка пяти эВ. При таком напряжении он испытывает неупругое столкновение с атомом ртути. Столкновение неупругое, так как у ртути есть связанный электрон с энергией 4.9 эВ. Если энергия внешнего электрона больше 4.9 эВ, то электрон может выбить связанный электрон из атома ртути. При этом энергия внешнего электрона

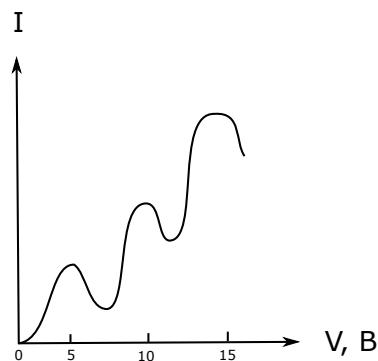


Рис. 3.5: Иллюстрация к эксперименту

уходит на ионизацию. Это приводит к тому, что электроны не долетают до анода и ток падает.

Таким образом, существуют стационарные состояния для электронов в атоме ртути. После первого минимума ток снова растёт. Это происходит потому, что электрон, пройдя половину расстояния до сетки, испытывает столкновение и теряет часть энергии. Однако за оставшуюся половину расстояния до сетки он снова может набрать энергию, достаточную для того, чтобы достичь анода.

## Лекция 4. Волновая природа материи.

Рассмотрим дифракцию электрона на двух щелях.

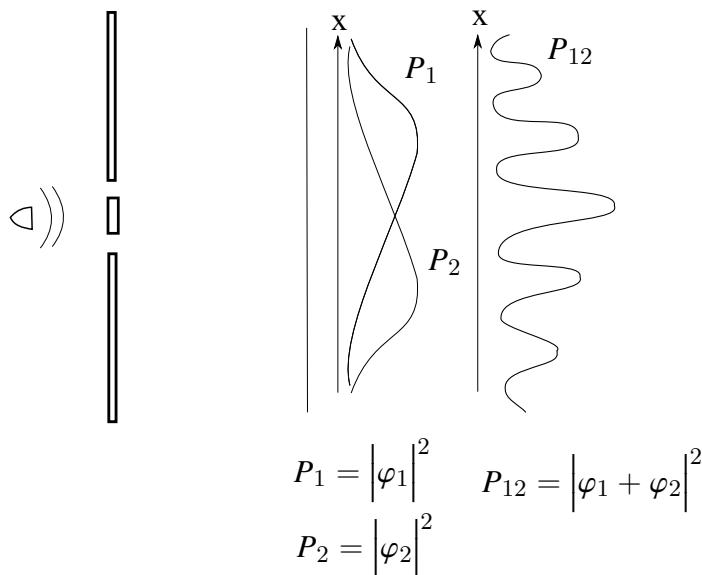


Рис. 4.1: Опыт с электронами

Для описания электрона ранее была введена волна вероятности  $a e^{i\varphi}$ . Обозначим то, что прошло через одно отверстие индексом 1, для другого отверстия - индекс 2. Тогда вероятность регистрации электрона в какой-либо точке равна

$$\left| a_1 e^{i\varphi_1} + a_2 e^{i\varphi_2} \right|^2 = a_1^2 + a_2^2 + 2a_1 a_2 \sin(\varphi_1 - \varphi_2) \quad (4.1)$$

### Опыт Рамзаура и Таунсенда

Некоторый объем заполнен атомами аргона. Этот объем облучается электронами с энергией в единицы эВ. Измеряется сечение рассеяния - вероятность для электрона отклонится от первоначального направления.

$\frac{d\sigma}{d\Omega}$  - число частиц, которые отклонились на единицу телесного угла.

Если электрон имеет большую энергию, сечение рассеяния стремится к нулю, то есть электроны не замечают наличие атомов аргона. При уменьшении энергии наблюдается рост сечения, что тоже соответствует классическим формулам и теории рассеяния. Однако, по классической теории сечение рассеяния должно монотонно возрастать.

Рассмотрим электрон с волновой точки зрения. Проведём следующую оптическую аналогию. На пути источника фотонов расположен непрозрачный экран. Меняем энергию излучения и наблюдаем изменения. В рамках геометрической оптики в точку рассмотрения

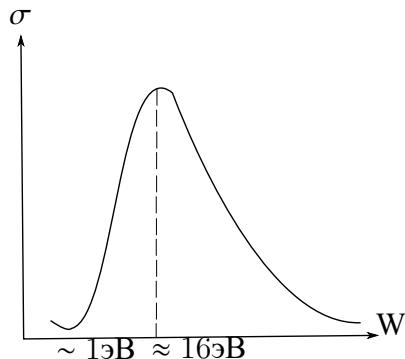


Рис. 4.2: Опыт Рамзауэра и Таунсенда



Рис. 4.3: Оптическая аналогия

ничего не попадёт. Однако при учете дифракции в рассматриваемой точке будут чередоваться максимумы и минимумы в зависимости от энергии. Если размер экрана меняется, то энергия фотонов, при которой будет наблюдаться максимум, также будет меняться.

Рассмотрим атом аргона как непрозрачный экран. Тогда рассматриваемый опыт может свести к описанной выше задаче. Тем самым можно объяснить наличие минимума и максимума на полученном графике.

## Волны де Бройля

Луи де Бройль предположил, что любой частице можно поставить в соответствие волну.

$$E = \hbar\omega \quad (4.2)$$

$$p = \hbar k \quad (4.3)$$

Возьмём четырёхвектор импульса для релятивистской частицы (Е - полная энергия частицы, в неё включена энергия покоя и энергия связи)

$$p_x, p_y, p_z, \frac{E}{c} \quad (4.4)$$

и поставим в соответствие четырёхвектор:

$$k_x, k_y, k_z, \frac{\omega}{c} \quad (4.5)$$

Учитывая, что  $E = \hbar\omega$  можно получить связь импульсов  $p_i$  с  $k_i$  (такую же, как у фотона). Но, в отличие от фотона, масса других частиц нулю не равна.

После того, как ввели  $k$  и  $\omega$ , можно записать

$$Ae^{i(\omega t - kr)} \quad (4.6)$$

$k$  можно посчитать через импульс, а  $\omega$  нужно считать через полную энергию (в отличие от фотона):  $\omega = \frac{E}{\hbar}$ .

Таким образом, мы ставим в соответствие частице плоскую монохроматическую волну с длиной волны де Бройля:

$$\lambda_B = \frac{\hbar}{p} \quad (4.7)$$

Тогда можно записать волну де Бройля:

$$Ae^{i(\omega t - kr)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(Et - pr)} \quad (4.8)$$

Для свободной частицы (нет потенциальной энергии и энергии связи):

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} \quad (4.9)$$

В нерелятивистском случае для свободной частиц

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} \approx mc^2 + \frac{p^2}{2m} \quad (4.10)$$

Таким образом, волна де Бройля для свободной нерелятивистской частиц

$$e^{\frac{i}{\hbar}(mc^2 t + kt)} \quad (4.11)$$

Для нерелятивистской частицы  $mc^2 \gg k$ . Тогда частота  $mc^2/\hbar$  очень большая. То есть у волны будет две частоты, одна из которых очень большая. Высокую частоту в опыте не наблюдают в результате усреднения.

Поэтому в нерелятивистском случае из аргумента экспоненты выкидывают  $mc^2$  (так как она даёт только константу). В результате для ясвободной нерелятивистской частицы получаем волну

$$e^{\frac{i}{\hbar}(kt - pr)} \quad (4.12)$$

**Пример.** Рассмотрим пылинку массой  $m = 1$  мкг и скоростью  $v = 0.1$  м/с.

Можно посчитать импульс и длину волны ( $\sim 10^{-20}$  м).

Если длина волны де Бройля частицы меньше характерного размера данной частицы:

$$\lambda_B \gg r_p \quad (4.13)$$

то квантовые свойства рассматриваемого объекта спрятаны внутри.

Таким образом, классические объекты имеют настолько маленькую длину волны де Брой-

ля, что квантовые эффекты не наблюдаются.

**Пример.** Рассмотрим электрон с энергией 1эВ. Для него длина волны де Бройля будет порядка 1мкм (будут наблюдаться квантовые эффекты).

Для энергии в 1 ГэВ (ультрапрелиativистский электрон)  $p^2c^4 \gg m^2c^4$ . Тогда получим, что  $E \approx pc$ . В результате

$$\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{hc}{E} \quad (4.14)$$

Разделим длину волны де Бройля на комптоновскую длину волны:

$$\frac{\lambda_B}{\lambda_c} = \frac{\frac{hc}{E}}{\frac{h}{mc}} = \frac{mc^2}{E} \ll 1 \quad (4.15)$$

То есть получаем, что такой электрон является классическим объектом (для его описания квантовая теория не требуется).

## Опыты Девиссона и Джермера

Дифракция рентгеновского излучения на периодической структуре - известный эффект. Для рентгеновского излучения, длина волны которого порядка периода кристаллической решётки кристалл является дифракционной решёткой.

Каждый атом рассеивает небольшую часть излучения во все стороны. Но под определённым углом рассеянные волны окажутся в фазе и дадут максимум.

Длины волн де Бройля для электронов тоже будут порядка периода кристаллической решётки.

**Опыты Девиссона и Джермера** - дифракция электронов на кристаллической решётке.

Пучок электронов направлен на кристалл под определённым углом. Можно менять напряжение на источнике, тем самым меняя скорость электронов. Детектируется ток электронов, дифрагировавших на кристалле.

Известны законы дифракции на кристалле для рентгеновского излучения - закон Вульфа-Брэгга:

$$n\lambda_n = 2ds\sin\theta_n \quad (4.16)$$

где  $d$  - период кристаллической структуры,  $\lambda_n$  - данная длина волны,  $\theta_n$  - угол наблюдения дифракции.

В эксперименте детектор был зафиксирован, изменялось напряжение (то есть изменялась энергия электронов).

Запишем длину волны для нерелятивистского электрона:

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (4.17)$$

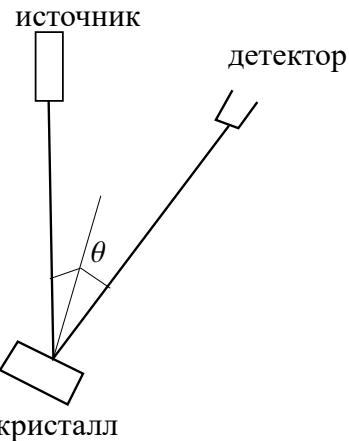


Рис. 4.4: Установка в опытах Девиссона и Джермера

Из закона ( $U$  - напряжение)

$$\frac{mv^2}{2} = eU \quad (4.18)$$

выразим скорость и подставим её в (4.17).

Тогда

$$\lambda_n = \frac{h}{\sqrt{2emU_n}} = \frac{A}{\sqrt{U_n}} \quad (4.19)$$

где  $A$  - некоторая константа.

В опытах наблюдалось:

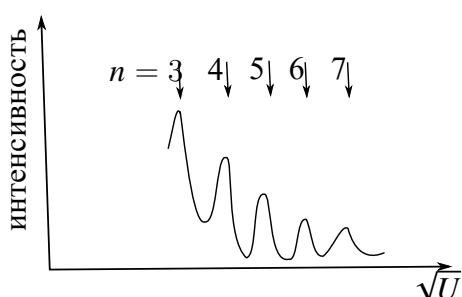


Рис. 4.5: Опыты Девиссона и Джермера

В зависимости интенсивности рассеяния от корня напряжения наблюдается череда максимумов, расположенных эквидистантно, причём расположение этих максимумов удовлетворяет закону Брэгга - Вульфа.

Таким образом, можно утверждать, что в данном опыте наблюдалась дифракция электронов на кристалле.

## Опыты Томпсона и Тартаковского

Опыты по дифракции на поликристаллических образцах.

Если есть пучок на фиксированной длине волны, то, так как поликристалл состоит из большого числа кристалликов, развернутых друг относительно друга, для любой длины волны всегда найдётся кристаллик, расположенный под правильным углом. Задача является двумерной, поэтому дифракция для данной длины волны и для данного  $d$  будет давать кольцо, что и наблюдалось в экспериментах.

Точно такие же кольца наблюдаются для рентгеновского излучения при дифракции на тех же поликристаллических образцах.

Рассмотрим дифракцию ослабленного пучка электронов (например, один электрон в секунду). В этом случае дифракционная картина также будет наблюдаться, так как волна де Броиля по сути волна вероятности.

## Дифракция холодных нейтронов

В термоядерном котле рождаются нейтроны с разными энергиями. Возьмём длинный графитовый стержень (графит - кристаллический материал). При рассмотрении спектра нейтронов, вышедших из дальнего конца стержня обнаружена коротковолновая граница. Оказывается, что коротковолновые нейтроны уходят в сторону, а длинноволновые идут по стержню.

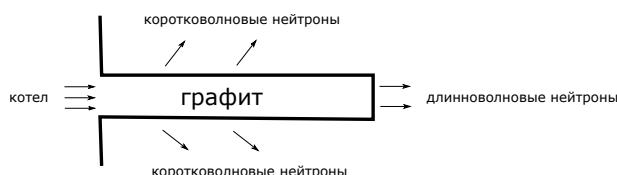


Рис. 4.6: Дифракция холодных нейтронов

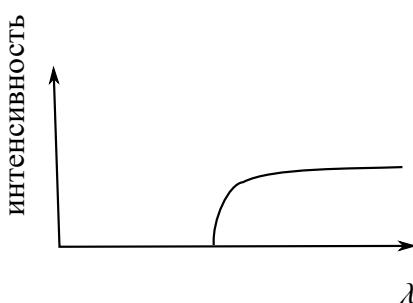


Рис. 4.7: Результат эксперимента

Рассмотрим предельный случай:  $\sin\theta = 1 \Rightarrow \lambda_{max} = 2d$ . Если  $\lambda > 2d$ , то формула

$$n\lambda_n = 2ds\sin\theta_n \quad (4.20)$$

не будет удовлетворена. То есть такие нейтроны не смогут дифрагировать на графите. Поэтому нейтроны с большой длиной волны и маленькой энергией будут свободно проходить вдоль графита, а нейтроны с большими энергиями будут дифрагировать и уходить в сторону. Этот эффект позволяет получить пучок холодных нейтронов.

## Наличие стационарных орбит в атоме водорода

Рассмотрим правило квантования:

$$mv a = n\hbar \quad (4.21)$$

Перепишем это уравнение следующим образом:

$$2\pi a = n \frac{\hbar \cdot 2\pi}{mv} = n\lambda_B \quad (4.22)$$

При этом  $2\pi a$  есть длина окружности, по которой движется электрон. Из уравнения следует, что на этой окружности должно укладываться целое число длин волн де Бройля. Это соответствует формированию стоячей волны: при одном обороте электрона вокруг атома фаза будет сохраняться. Это и будет условием стационарности.

Однако, нельзя утверждать, что волна де Бройля и электромагнитная волна это одно и то же. Волна де Бройля - это волна вероятности, приписываемая одной частице. Электромагнитная волна описывает свойства большого числа одинаковых фотонов (поэтому электромагнитная волна некvantовый объект).

## Локализация квантовой частицы

Запишем волну де Бройля для частицы:

$$A e^{\frac{i}{\hbar}(E_0 t - p_0 r)} \quad (4.23)$$

Эта функция определена во всем 3D пространстве. Более того, во всех точках нахождение частицы равновероятно. Таким образом, нельзя определить конкретное положение частицы по волне де Бройля. То есть, можно утверждать, что частица не имеет траектории в классическом смысле.

Однако, можно локализовать частицу в пространстве, используя волновой пакет. Предположим, что частицы обладает импульсами в промежутке  $[p_0 - \frac{\Delta p}{2}, p_0 + \frac{\Delta p}{2}]$  (аналогично для  $k$ ).

Тогда для непрерывного спектра волновых векторов можно записать:

$$U(r) = \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} a(k) \cos(\omega t - kz) dk \quad (4.24)$$

Для дискретного случая будет сумма. В обоих случаях мы суммируем плоские волны - создаём волновой пакет.

Сделаем упрощение - будем считать, что  $a(k) = a_0 = const.$

Считая, что  $\Delta k \ll k_0$ , разложим  $\omega(k)$  в ряд Тейлора вблизи  $k_0$ :

$$\omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0) \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_0} + \dots \quad (4.25)$$

Подставим в (4.24):

$$U(r) = a_0 \int \cos(\omega_0 t + (k - k_0) v_g \cdot t - kz) dk \quad (4.26)$$

где  $v_g = \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_0}$ .

После взятия интеграла получим

$$U(r) = 2a_0 \Delta k \frac{\sin(\Delta k \cdot \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k_0} \cdot t - kz)}{\Delta k \cdot \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k_0} - kz} \cdot \cos(\omega_0 t - kz) \quad (4.27)$$

В результате получили функцию, которая является произведением волны на несущей частоте (косинус) и модуляции (медленно меняющаяся функция).

Для такой системы можно ввести фазовую скорость:

$$v_\phi = \frac{\omega_0}{k} \quad (4.28)$$

При этом групповая скорость (скорость смещения энергии):

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_0} \quad (4.29)$$

При этом мы получили локализацию частицы:

Стоит учитывать, что дисперсия приводит к расплыванию волнового пакета при его перемещении.

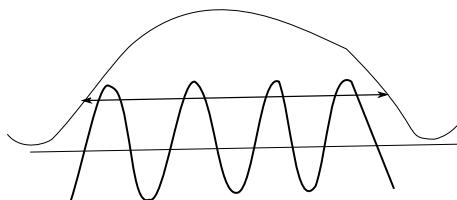


Рис. 4.8: Пространственная локализация частицы

Для фотона в вакууме можно доказать, что:

$$v_\phi = v_g = c \quad (4.30)$$

так как

$$v_\phi = \frac{E}{p} \quad v_g = \frac{dE}{dp} \quad (4.31)$$

Также стоит отметить, что частота, как свойство (поля, частицы и т.д.) не меняется, но меняется волновой вектор. Поэтому групповую скорость часто записывают следующим образом:

$$v_g = \left( \frac{dk}{d\omega} \right)^{-1} \quad (4.32)$$

**Пример.** Рассмотрим нерелятивистскую частицу (ее энергия равна  $p^2/(2m)$ ), движущуюся со скоростью  $v$ . Для неё оказывается, что

$$v_\phi = \frac{v}{2} \quad v_g = v \quad (4.33)$$

Для свободной релятивистской частицы можно получить, что

$$v_\phi \cdot v_g = c^2 \quad (4.34)$$

причём  $v_g < c$ . Поэтому получаем, что фазовая скорость будет больше групповой.

## Соотношение неопределённости Гейзенberга

Рассмотрим дифракцию волны де Бройля на щели с характерным размером  $\Delta x$ . Из электромагнитной теории известно, что угол дифракции равен

$$\Delta\theta = \frac{\lambda_B}{\Delta x} \quad (4.35)$$

Тогда можно получить изменение импульса в поперечном направлении:

$$\Delta p_x = p_0 \Delta\theta = p_0 \frac{\lambda_B}{\Delta x} \quad (4.36)$$

Откуда получаем соотношение Гейзенберга:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x = h \quad (4.37)$$

произведение неопределённостей импульса и координаты равно постоянной Планка. То есть, увеличивая точность измерения координаты (уменьшая размер щели), получим более широкий разброс по импульсам (более широкую дифракционную картину).

Пространство импульсов и пространство координат связаны преобразованием Фурье:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(k) e^{ikx} dk \quad (4.38)$$

Если есть некоторая неопределённость по x:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_0 & x_1 < x < x_2 \\ 0 & \text{в остальных случаях} \end{cases}$$

то тут же появляется неопределённость по k такую, что:

$$\Delta k \cdot \Delta x \approx 2\pi \quad (4.39)$$

Отсюда следует, что из данных двух величин (координаты и импульса) нельзя обе измерить точно одновременно (если одна неопределённость стремится к нулю, то другая - к бесконечности)

Существует ещё одно соотношение неопределённости:

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar \quad (4.40)$$

где  $\Delta E$  - неопределённость измерения энергии,  $\Delta t$  - неопределённость во времени (время измерения).

Из него следует, что существует ограничение на точность измерения энергии, так как время измерения величины конечно.

## Лекция 5. Основы квантовой механики.

### Волновая функция и её нормировка

Плотность вероятности найти частицу в определённый момент времени в определённой точке пространства определяется как

$$\rho(r, t) = |\psi(r, t)|^2 \quad (5.1)$$

Условие нормировки (частица точно где-то существует):

$$\int_V \rho(r, t) dv = 1 \quad (5.2)$$

Запишем волну де Бройля свободной частицы (она определена во всем пространстве):

$$\psi(r, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - pr)} \quad (5.3)$$

При подстановке этой функции в (5.1) получим, что вероятность обнаружить частицу одинакова во всех точках пространства. при этом интеграл (5.2) будет расходящимся.

Введём функцию:

$$\psi_p(x) = A e^{\frac{i}{\hbar}px} \quad (5.4)$$

и ограничим её область определения:  $-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$ .

Тогда условие нормировки будет выполнено, откуда получим нормировочный множитель:

$$A = \frac{1}{\sqrt{L}}.$$

Ведём интеграл вида:

$$I = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \psi_{p'}^*(x) \psi_p(x) dx \quad (5.5)$$

Подставим выражения для функции и нормировочного множителя:

$$I = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} dx \propto \frac{\sin \Delta p \cdot x}{\Delta p \cdot x} \quad (5.6)$$

Теперь посчитаем предел от данного интеграла. По определению дельта-функции получим:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} I = \delta(p - p') \quad (5.7)$$

Тогда окончательно

$$\psi_p(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar} px} \quad (5.8)$$

Полученная функция называется волновой функцией свободной частицы, нормированная на дельта-функцию в смысле (5.7). Вся процедура, описанная выше, называется процедурой нормировки на дельта-функцию.

В силу нормированности этой функции соответствующие интегралы уже не будут расходиться.

Аналогично для трёхмерного случая можно получить:

$$\psi_p(r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} pr} \quad (5.9)$$

Плотность вероятности - вероятность найти частицу в момент времени  $t$  в объёме  $dV$ :

$$w(t) = |\psi(r, t)|^2 dV \quad (5.10)$$

## Средние значения физических величин

Волновую функцию измерить нельзя, однако, для физической величины можно измерить её среднее значение.

Например, для  $r$  в соответствии с правилами теории вероятности, получаем:

$$\langle \vec{r}(t) \rangle = \int_V r \cdot |\psi(r, t)|^2 dV = \int_V \psi^* \cdot r \cdot \psi dV \quad (5.11)$$

Заметим, что данная величина зависит от времени, так как усреднение идёт по плотности вероятности (не по времени, и не по ансамблю) (среднее значение  $r$  по всем возможным квантовым состояниям системы).

Посчитаем средний импульс частицы. Для этого возьмём волновые функции свободной частицы и составим волновой пакет:

$$\psi(x) = \sum_i C_{p_i} \psi_{p_i}(x) \quad (5.12)$$

Где коэффициенты имеют следующий физический смысл:  $|C_{p_i}|^2$  - вероятность найти частицу в состоянии с волновой функцией  $\psi_{p_i}$ . Это следует из условия нормировки а также из того, что  $\psi_{p_i}$  нормированы на дельта-функцию, то есть они ортогональны друг другу.

Аналогично для непрерывного спектра волновых функций:

$$\psi(x) = \int C_p \psi_p(x) dp \quad (5.13)$$

Причём  $|C_p|^2$  вероятность того, что частица имеет импульс  $p$  с возможным разбросом в интервале шириной  $dp$ .

Воспользовавшись свойствами Фурье-преобразования, возьмём обратный интеграл и тем самым найдём коэффициенты:

$$C_p = \int \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} dx = \int \psi(x) \psi_p^* dx \quad (5.14)$$

Найдём среднее значение импульса. По определению (а также учитывая, что  $|C_p|^2 dp \Leftrightarrow dp dp' \cdot C_p^* \cdot C_p \cdot \delta(p - p')$ ):

$$\langle p \rangle = \int p |C_p|^2 dp = \int dp dp' p \cdot C_p^* \cdot C_p \cdot \delta(p - p') = \quad (5.15)$$

Подставим (5.14):

$$= \int dx \int C_{p'}^* e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} \frac{dp'}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \cdot \int C_p p e^{\frac{i}{\hbar} px} \frac{dp}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \quad (5.16)$$

Заметим, что

$$\int C_{p'}^* e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} \frac{dp'}{(2\pi\hbar)^{1/2}} = \psi^*(x) \quad (5.17)$$

и

$$\int C_p p e^{\frac{i}{\hbar} px} \frac{dp}{(2\pi\hbar)^{1/2}} = -i\hbar \frac{d\psi}{dx} \quad (5.18)$$

Тогда

$$\langle p \rangle = \int \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx \quad (5.19)$$

где  $\hat{p}$  - оператор импульса:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (5.20)$$

Аналогично

$$\langle p^2 \rangle = \int \psi^*(x) \hat{p}^2 \psi(x) dx \quad (5.21)$$

Среднее значение координаты:

$$\langle r \rangle = \int \psi^*(x) \hat{r} \psi(x) dr \quad (5.22)$$

Таким образом, в квантовой физике всем физическим величинам ставится в соответствие операторы. В квантовой физике существует среднее значение импульса, дисперсия импульса, оператор импульса и т.д (однако не существует просто импульса, как в классической физике).

Рассмотрим свободную частицу с импульсом  $p_0$ :

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar}p_0x} \quad (5.23)$$

Посчитаем среднее:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int e^{-\frac{i}{\hbar}p_0x} \cdot \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}p_0x} dx = p_0 \quad (5.24)$$

Среднее значение импульса равно  $p_0$ , так как мы рассматриваем частицу с точным (известным) значением импульса.

В самом общем случае для некоторой физической (и измеримой) величины  $f$  среднее значение считается по правилу:

$$\langle f \rangle = \int_V \psi^* \hat{f} \psi dV \quad (5.25)$$

где  $\hat{f}$  - оператор физической величины, а система находится в состоянии с волновой функцией  $\psi$ .

## Операторы физических величин

Рассмотрим оператор импульса. Он имеет три проекции:

$$\hat{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) \quad (5.26)$$

Для каждой из проекций можно записать формулу аналогично (5.20).

Если есть функция  $\xi(r)$ , зависящая только от координаты, то оператором для этой величины будет сама эта функция (действие оператора равносильно умножению на данную величину). Так, любой потенциал, являясь функцией только координаты, соответствует оператору, действие которого сводится к умножению функции на величину потенциала в точке.

Существует правило: для измеримых физических величин в декартовой системе координат классические формулы, связывающие числовые значения величины с другими величинами переносятся в квантовую физику с заменой всех величин на их операторы.

То есть, если  $a, b, c, d, e$  - физические величины, связанные формулой:

$$a = \frac{b \cdot c \cdot d}{e} \quad (5.27)$$

то в квантовой физике их связь выражена

$$\hat{a} = \frac{\hat{b} \cdot \hat{c} \cdot \hat{d}}{\hat{e}} \quad (5.28)$$

**Пример.** Кинетическая энергия  $K = \frac{p^2}{2m}$ . Тогда её оператор

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \cdot (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \quad (5.29)$$

Проверим справедливость того, что полученный оператор является оператором, описывающим кинетическую энергию. Возьмём среднее значение для дебройлевской частицы со кинетической энергией  $K_0$ . По определению запишем интеграл и посчитаем его:

$$\langle K \rangle = \int \psi_p^* \hat{K} \psi_p dx = K_0 \quad (5.30)$$

Отсюда следует, что форма оператора является верной.

Посчитаем дисперсию для импульса для свободной частицы:

$$D = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = 0 \quad (5.31)$$

Дисперсия оказывается равной нулю, так как для свободной частицы импульс определён точно. Вообще говоря, дисперсия нулю не равна.

## Собственные значения операторов

Запишем операторное уравнение вида:

$$\hat{f}\psi = f_0\psi \quad (5.32)$$

По сути это есть уравнение на собственные функции и собственные значения оператора  $\hat{f}$ .

Решения могут быть дискретными, тогда будет дискретный набор функций и собственных значений  $\psi_m, f_{0m}$ . Решения также могут быть непрерывными - непрерывный спектр волновых функций и собственных значений.

Получим среднее значение величины  $f$ , для которой был построен оператор  $\hat{f}$

$$\langle f \rangle = \int_V \psi^* \hat{f} \psi dV = \langle f \rangle = \int_V \psi^* \cdot f_0 \cdot \psi dV = f_0 \int_V \psi^* \psi dV = f_{0m} \quad (5.33)$$

так как по определению  $\int \psi^* \psi dV = 1$ .

Таким образом, решением задачи на собственные функции и собственные значения будет набор волновых функций состояния системы и набор измеряемых величин (собственные значения). Измерить некоторую величину можно только когда система находится в одном из своих возможных состояний. Если такое состояние одно (как у де бройлевской частицы), то, взяв оператор импульса, получим уравнение:

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \psi = \hat{p} \psi \quad (5.34)$$

преобразуем:

$$\frac{d\psi}{\psi} = i \frac{p_0}{\hbar} dx \quad (5.35)$$

решение:

$$\psi = \psi_0 e^{i \frac{p_0}{\hbar} x} \quad (5.36)$$

Получили волновую функцию (де бройлевскую волну). Собственное значение одно и равно  $p_0$ .

Посчитаем:

$$\langle f^2 \rangle = \int \psi^* \hat{f} \hat{f} \psi dV = f_0^2 \quad (5.37)$$

То есть, если система находится в состояниях с собственной волновой функцией (в состоянии, удовлетворяющем уравнению (5.32)), то дисперсия для такой системы  $D = 0$ . Значит, соответствующую физическую величину можно измерить точно.

Если система находится в более сложном состоянии, например (система в суперпозиции собственных состояний):

$$\psi(x) = \sum C_p \psi_p \quad (5.38)$$

то дисперсия собственных значений уже не будет равна нулю, так как

$$(a + b + c)^2 \neq a^2 + b^2 + c^2 \quad (5.39)$$

Таким образом, чтобы однозначно измерить физическую величину, система должна находиться в состоянии, соответствующем собственной функции данной системы.

## Оператор момента импульса

Рассмотрим момент импульса:

$$M = [r, p] = \begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}$$

Тогда, чтобы посчитать оператор момента импульса, нужно записать:

$$\hat{M} = [\hat{r}, \hat{p}] = \begin{vmatrix} i & j & k \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix}$$

Рассмотрим оператор проекции момента импульса на ось z (учтём, что оператор координаты есть сама координата):

$$\hat{M}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = x\left(-i\hbar\frac{d}{dy}\right) - y\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right) = -i\hbar\left(x\frac{d}{dy} - y\frac{d}{dx}\right) \quad (5.40)$$

Перейдём к сферическим координатам:

$$z = r\cos\theta \quad (5.41)$$

$$x = r\sin\theta\sin\varphi \quad y = r\sin\theta\cos\varphi \quad (5.42)$$

Посчитаем, чему равен оператор  $\frac{d}{d\varphi}$ :

$$\frac{d}{d\varphi} = \frac{dx}{d\varphi}\frac{d}{dx} + \frac{dy}{d\varphi}\frac{d}{dy} + \frac{dz}{d\varphi}\frac{d}{dz} \quad (5.43)$$

Подставим выражения для сферических координат:

$$\frac{d}{d\varphi} = r\sin\theta\cos\varphi\frac{d}{dx} - r\sin\theta\sin\varphi\frac{d}{dy} = y\frac{d}{dx} - x\frac{d}{dy} \quad (5.44)$$

Таким образом, получаем

$$\hat{M}_z = -i\hbar\frac{d}{d\varphi} \quad (5.45)$$

Заметим, что данный оператор имеет сходство с оператором проекции импульса.

Найдём собственные функции и собственные значение оператора проекции момента импульса:

$$\hat{M}_z\psi = M_z\psi \quad (5.46)$$

После подстановки выражения для оператора:

$$\frac{d\psi}{d\varphi} = \frac{i}{\hbar} M_z d\varphi \quad (5.47)$$

Решение:

$$\psi = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar} M_z \varphi} \quad (5.48)$$

Операторное уравнение должно давать однозначное решение. То есть должно выполняться:

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi) \quad (5.49)$$

что равносильно выражению

$$e^{\frac{i}{\hbar} M_z \cdot 2\pi} = 1 \quad (5.50)$$

Решая уравнение, получаем:

$$\frac{M_z}{\hbar} 2\pi = 2\pi m \quad (5.51)$$

отсюда получаем собственные значения проекции момента импульса на ось z:

$$M_z = m\hbar \quad (5.52)$$

В процессе вывода данной формулы мы не делали никаких предположений о системе. Таким образом, можно сделать вывод, что любая система, обладающая моментом импульса, обязана иметь квантованные значения оператора момента импульса.

По сути уравнение (5.52) есть правило квантования Бора, так как

$$m_0 v r = n\hbar \quad (5.53)$$

Однако, отсюда следует, что и волчок должен обладать квантованными значениями момента импульса. То есть, измеряя момент импульса волчка, мы должны получить не непрерывный спектр, а дискретный спектр значений. Однако, следует учесть, что шаг между возможными значениями проекций равен  $\hbar$ . С таким шагом померить нельзя (при измерении не будет видна разница между двумя соседними значениями). Также нужно учитывать, что оси z нет до тех пор, пока не начнётся процедура измерения (вообще говоря, мы можем направить ось куда угодно, однако, когда начинается процедура измерения, автоматически вводится ось z). Таким образом, в момент измерения возникает ось z и возникает квантование. Есть квантовые системы, для которых ось z присутствует по определению. Для таких систем есть некоторые дополнительные взаимодействия. Например, для атома водорода в однородном магнитном поле направление магнитного поля и является осью z и будет происходить квантование независимо от измерения. Процедура квантования может обнаружить проекции (если измерять проекции на другие оси, их значения будут другими).

## Общая формулировка соотношения неопределённости

Соотношение неопределённости Гейзенберга утверждает, что невозможно одновременно точно измерить значение координаты и импульса:

$$\delta x \cdot \delta p \geq h \quad (5.54)$$

Для де бройлевской частицы импульс определён точно (погрешность измерения равна нулю). Тогда  $x$  должен быть равен бесконечности (частица размазана по пространству).

Рассмотрим две физические величины  $A$  и  $B$ . Построим их операторы. Чтобы понять, являются ли данные две физические величины одновременно измеримы, нужно построить коммутатор операторов этих величин:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (5.55)$$

Рассмотрим частный случай коммутатора операторов координаты и импульса (подействуем коммутатором на некоторую функцию):

$$[x, \hat{p}_x] \psi = \left( x \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) - \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) x \right) \psi(x) = -i\hbar \cdot x \frac{d\psi}{dx} + i\hbar \cdot x \frac{d\psi}{dx} + i\hbar \psi = i\hbar \psi \quad (5.56)$$

Тогда коммутатор равен

$$[x, \hat{p}_x] = i\hbar \quad (5.57)$$

Аналогично для  $x$  и  $p_y$

$$[x, \hat{p}_y] = 0 \quad (5.58)$$

Получаем, что тождество (5.57) эквивалентно соотношению неопределённости Гейзенберга.

Для оператора проекции импульса и кинетической энергии можно получить

$$[\hat{p}_x, K] = 0 \quad (5.59)$$

Соотношение неопределённости Гейзенберга можно переформулировать: если коммутатор операторов двух физических величин не равен нулю  $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ , то физические величины нельзя измерить одновременно (для них можно записать аналог соотношения неопределённости).

Если коммутатор двух физических величин равен нулю  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , то эти две величины одновременно и точно измеримы.

## Оператор Гамильтона

Введём оператор Гамильтона - оператор полной энергии системы:

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U} \quad (5.60)$$

Для потенциальной энергии оператор действует по правилу, описанному выше.  
Среднее значение оператора Гамильтона равно

$$\langle H \rangle = \langle K \rangle + \langle U \rangle \quad (5.61)$$

Тогда получается, что для некоторой физической системы закон сохранения энергии выполняться не должен, так как закон сохранения энергии должен выполняться для средних величин. Однако выражение  $H = K + U$  вообще говоря константой не является.

Запишем операторное уравнение

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (5.62)$$

где  $E$  - собственная энергия системы (собственные значения оператора Гамильтона),  $\psi$  - волновые функции системы. Данное уравнение является стационарным уравнением Шрёдингера. Оно применимо для системы, в которой сохраняется (в среднем) энергия системы.

Рассмотрим свободную частицу, то есть частицу, для которой:

$$\hat{V} = 0 \quad (5.63)$$

Тогда

$$\hat{H} = \hat{K} \quad (5.64)$$

Тогда уравнение Шрёдингера становится уравнением

$$\hat{K}\psi = K_0\psi \quad (5.65)$$

## Лекция 6. Потенциальная яма.

### Стационарное уравнение Шредингера

Каждой физической величине ставится в соответствие оператор, который действует на волновую функцию, описывающую состояние системы.

Для каждого оператора  $\hat{L}$  можно записать операторное уравнение на собственные функции и собственные значения:

$$\hat{L}\psi = L_0\psi \quad (6.1)$$

Если система находится в одном из собственных состояний, соответствующих собственным функциям уравнения (6.1), то

$$\langle L \rangle = L_0 \quad (6.2)$$

где  $L_0$  - фиксированная величина, соответствующая функции, в которой находится система. Именно эти величины  $L_0$  и могут быть измерены в опыте.

В опыте можно измерить только вещественные величины, то есть операторы физических величин должны быть эрмитовыми (так как собственные значения эрмитова оператора - действительные числа).

Ранее были введены операторы  $f(\hat{x})$ ,  $\hat{p}_x$ ,  $\hat{p}$ ,  $\hat{M}$ ,  $\hat{M}_z$ ,  $\hat{K}$ .

Для нерелятивистского случая был введен оператор полной энергии:

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U} \quad (6.3)$$

где  $U$  - потенциальная энергия системы, зависящая только от координат.

Стационарное уравнение Шредингера - уравнение на собственные функции оператора Гамильтона:

$$\hat{H}\psi = E_0\psi \quad (6.4)$$

Для свободной частицы решением будут волны де Бройля.

В общем случае решение можно записать в виде совокупности двух волн де Бройля, движущихся в противоположных направлениях:

$$\psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (6.5)$$

Уравнение (6.2) является дифференциальным. Для нахождения решения необходимо граничное условие.

## Нестационарное уравнение Шредингера

В случае стационарного уравнения Шрёдингера полная энергия сохраняется. Когда полная энергия не сохраняется, говорят о нестационарном уравнении Шрёдингера.

Оператор эволюции системы описывает эволюцию системы во времени.

Нестационарное уравнение Шредингера записывается следующим образом:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H}\psi \quad (6.6)$$

где в левой части стоит оператор эволюции, действующий на функцию  $\psi(r, t)$ . Оператор  $\hat{H}(t)$  может зависеть от времени.

Рассмотрим случай  $\hat{H}(t) = \text{const}$ . Предположим, что решение в этом случае можно представить как произведение координатной и временной частей:

$$\psi(r, t) = \varphi(r)\xi(t) \quad (6.7)$$

Распишем производную некоторой функции(считаем, что x и y могут зависеть от t):

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x, y) = \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial t} \quad (6.8)$$

То есть, после подстановки в нестационарное уравнение Шредингера, получим:

$$\varphi(r)i\hbar \frac{\partial \xi}{\partial t} = \xi(t)\hat{H}\varphi \quad (6.9)$$

Разделим переменные:

$$\frac{i\hbar}{\xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{1}{\varphi} \hat{H}\varphi \quad (6.10)$$

В левой части уравнения стоит выражение, зависящее только от координат, в правой - только от времени. Тогда, чтобы равенство выполнялось, нужно, чтобы и правая, и левая часть равнялись некоторой константе

$$\frac{i\hbar}{\xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{1}{\varphi} \hat{H}\varphi = E_0 \quad (6.11)$$

Тогда получаем два уравнения

$$\frac{i\hbar}{\xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} = E_0 \Rightarrow \xi = \xi_0 e^{\frac{i}{\hbar} E_0 t} \quad (6.12)$$

$$\hat{H}\varphi = E_0 \varphi \quad (6.13)$$

Причём второе уравнение - стационарное уравнение Шредингера для координатной части волновой функции.

Тогда получаем, что

$$\psi(r, t) = \xi_0 e^{\frac{i}{\hbar} E_0 t} \cdot \varphi(r) \quad (6.14)$$

где  $\varphi(r)$  удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера.

Заметим, что стационарное состояние - это состояние, в котором сохраняется полная энергия. Однако это не означает, что волновая функция не зависит от времени. От времени не зависит плотность вероятности (так как при взятии модуля экспонента равна единице).

Таким образом, стационарное уравнение Шредингера может быть получено из нестационарного, если положить  $\hat{H}(t) = \text{const.}$

## Уравнение непрерывности

Рассмотрим уравнение непрерывности (изменение объёмной плотности заряда  $\rho$  в данном объёме определяется потоком заряженных частиц через этот объём  $j$ ):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0 \quad (6.15)$$

Уравнение непрерывности также встречается также в гидродинамике и в других разделах физики.

Получим уравнение непрерывности и в случае квантовой физики. Запишем нестационарное уравнение Шредингера в виде:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + u\psi \Big| \cdot \psi^* \quad (6.16)$$

Напишем комплексно-сопряжённое к данному уравнению:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + u\psi^* \Big| \cdot \psi \quad (6.17)$$

Домножим уравнение (6.16) на  $\psi^*$  (6.17) на  $\psi$  и вычтем из одного другое. Получим:

$$i\hbar \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* \right) \quad (6.18)$$

Запишем это уравнение в виде:

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2mi} \nabla \left( \psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) \quad (6.19)$$

Тогда плотность вероятности:

$$\rho = |\psi|^2 \quad (6.20)$$

Введём поток вероятности:

$$j = \frac{\hbar^2}{2mi} \nabla (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (6.21)$$

Тогда получаем из (6.16) уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0 \quad (6.22)$$

Изменение плотности вероятности нахождения частицы в элементарном объёме определяется потоком вероятности в этот объём.

## Теорема Эренфеста

Пусть есть некоторый оператор:

$$\hat{L} = f(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}) \quad (6.23)$$

Из классической теории известен закон Ньютона:  $m\vec{a} = \vec{F}$ .

Возникает вопрос, возможен ли переход от этого уравнения к средним величинам:  $m < \hat{a} > = < \vec{F} >$ .

Запишем среднее значение величина:

$$\langle L \rangle = \int \psi^* \hat{L} \psi dV \quad (6.24)$$

Формально возьмём производную:

$$\frac{d}{dt} \langle L \rangle = \int \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \psi dV + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{L} \psi dV + \int \psi^* \hat{L} \frac{\partial \psi}{\partial t} dV \quad (6.25)$$

Причём  $\psi$  удовлетворяет нестационарному уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \quad (6.26)$$

Тогда можно продолжить равенство (6.25) следующим образом:

$$= \int \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \psi dV + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{H}\psi^*) (\hat{L}\psi) dV - \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \hat{L} \hat{H} \psi dV \quad (6.27)$$

В силу эрмитовости операторов одно подынтегральное выражение можно переписать:  
 $(\hat{H}\psi^*)(\hat{L}\psi) = \psi^*\hat{H}\hat{L}\psi$ . Тогда получим:

$$\frac{d < L >}{dt} = \int \psi^* \left( \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H} \right) \psi dV \quad (6.28)$$

Таким образом

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{L}] \quad (6.29)$$

Где  $[\hat{H}, \hat{L}]$  - скобка Пуассона от  $\hat{H}$  и  $\hat{L}$ .

Предположим, что  $L$  не зависит явно от времени:  $\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = 0$ . Тогда

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = [\hat{H}, \hat{L}] \quad (6.30)$$

Рассмотрим оператор координаты:

$$\hat{L} = \hat{x} \quad \frac{d\hat{x}}{dt} = [\hat{H}, \hat{x}] \quad (6.31)$$

и оператор проекции импульса:

$$\hat{L} = \hat{p}_x \quad \frac{d\hat{p}_x}{dt} = [\hat{H}, \hat{p}_x] \quad (6.32)$$

Распишем скобки Пуассона:

$$[\hat{H}, \hat{x}] = \hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 x - x\hat{p}_x^2) \quad (6.33)$$

Запишем

$$\hat{p}_x^2 \cdot x = \hat{p}_x(\hat{p}_x x) \quad (6.34)$$

Известно, что коммутатор

$$[\hat{p}_x \hat{x}] = p_x x - x p_x = i\hbar \quad (6.35)$$

Тогда, выразив  $p_x x$ , получим:

$$\hat{p}_x^2 \cdot x = \hat{p}_x(x\hat{p}_x + i\hbar) = \hat{p}_x(x\hat{p}_x) + i\hbar\hat{p}_x = x\hat{p}_x^2 + \frac{2\hat{p}_x\hbar}{i} \quad (6.36)$$

Вернёмся к уравнению (6.31)

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{\hat{p}_x}{m} \quad (6.37)$$

Отсюда следует, что

$$\frac{d < x >}{dt} = \frac{< \hat{p}_x >}{m} \quad (6.38)$$

Аналогично можно поступить для оператора  $\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}$ .

Учтём, что оператор кинетической энергии и оператор проекции импульса имеют совпадающие собственные значения и собственные функции. Значит,  $[\hat{K}, \hat{p}_x] = 0$ . Тогда

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = [U, \hat{p}_x] = Up_x - p_x U = \frac{\partial U}{\partial x} = F(x) \quad (6.39)$$

Тогда получаем

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = [\hat{H}, \hat{p}_x] = F(x) \quad (6.40)$$

а для среднего значения:

$$\frac{d \langle \hat{p}_x \rangle}{dt} = \langle F(x) \rangle \quad (6.41)$$

То есть, между средним значением импульса и средним значением силы, действующим на систему сохраняется второй закон Ньютона (речь идёт о квантовомеханическом усреднении).

**Теорема Эренфеста:** в квантовой механике соотношения между классическими величинами в классической физике сохраняются для средних значений:

$$\frac{d \langle \hat{p}_x \rangle}{dt} = \langle F(x) \rangle \quad (6.42)$$

и

$$\frac{d \langle x \rangle}{dt} = \langle \hat{p}_x \rangle \quad (6.43)$$

Заметим, что формула

$$\langle H \rangle = \langle K \rangle + \langle V \rangle \quad (6.44)$$

не утверждает, что полная энергия сохраняется в каждый момент времени и в любой точке пространства. Можно утверждать лишь что при усреднении в квантовомеханическом смысле полная энергия будет сохраняться.

## Бесконечная потенциальная яма

Рассмотрим некоторую потенциальную яму:

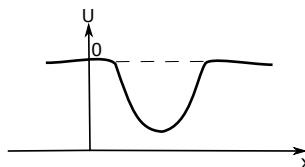


Рис. 6.1: Потенциальная яма

Соотношение неопределённости Гейзенberга создаёт различие в поведении частицы в яме в сравнении с классической физикой.

Рассмотрим бесконечную потенциальную яму.

Разобьём всю область распределения на три области (рис. 6.2). Тогда

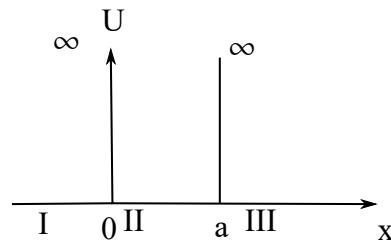


Рис. 6.2: Бесконечная потенциальная яма

$$U_I = U_{III} = \infty \quad (6.45)$$

$$U_{II} = 0 \quad (6.46)$$

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + U(x) \cdot \psi = E\psi \quad (6.47)$$

В первой и третьей областях это уравнение примет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{I,III} + \infty \cdot \psi_{I,III} = E\psi_{I,III} \quad (6.48)$$

Единственное решение этого уравнения:

$$\psi_{I,III} = 0 \quad (6.49)$$

Для второй области:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II} = E\psi_{II} \quad (6.50)$$

Перепишем это уравнение в виде:

$$\ddot{\psi}_{II} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_{II} = 0 \quad (6.51)$$

Обозначим:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \quad (6.52)$$

Данная величина больше нуля, так как энергия частицы не может быть отрицательной.

Получаем уравнение осциллятора:

$$\ddot{\psi}_{II} + k^2 \psi_{II} = 0 \quad (6.53)$$

его решение:

$$\psi_{\text{II}} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (6.54)$$

или (другая запись решения):

$$\psi_{\text{II}} = Asinkx + Bcoskx \quad (6.55)$$

Волновая функция должна быть непрерывной, гладкой и однозначной. Поэтому должны выполняться следующие граничные условия (обеспечение непрерывности):

$$\psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0) \quad (6.56)$$

$$\psi_{\text{III}}(a) = \psi_{\text{II}}(a) \quad (6.57)$$

Тогда

$$0 + B = 0 \Rightarrow B = 0 \quad (6.58)$$

$$Asinka + Bcoska = 0 \Rightarrow Asinka = 0 \quad (6.59)$$

$$\Rightarrow ka = \pi n, n > 0 \quad (6.60)$$

При  $n = 0$  получаем тривиальное решение.

В результате получаем

$$k_n^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2} = \pi^2 n^2 \quad (6.61)$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, n > 0 \quad (6.62)$$

Таким образом, спектр частицы оказывается дискретным. (Для любой системы если частица ограничена в пространстве, спектр состояния частицы дискретен.) Заметим, что чем шире яма, тем меньше расстояния между уровнями.

Волновая функция имеет вид:

$$\psi = Asink_n x \quad (6.63)$$

Чтобы узнать A, посчитаем интеграл:

$$\int_0^a |\psi|^2 dx = 1 \quad (6.64)$$

После вычисления получим  $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ .

Построим полученную волновую функцию:

Заметим, что данная функция не является гладкой. Это требование не использовалось, так как в этом случае система уравнений оказалась бы избыточной и не было бы однознач-

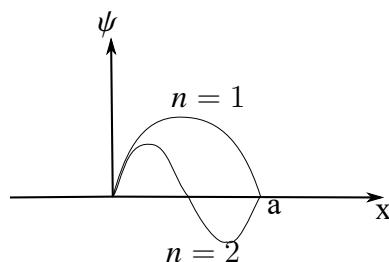


Рис. 6.3: Волновые функции

ного решения. Дело в том, что рассматриваемый объект является физически нереализуемым.

Отметим также, что для разных ситуаций (разные волновые функции) вероятность найти частицу в определенной точке ямы будет разная.

Рассмотрим предельный переход к классической теории: \$n\$ должно быть очень велико. Тогда волновая функция будет сильно осциллировать и при усреднении даст константу, что согласуется с классическим подходом.

Рассмотрим следующее состояние:

$$n = 1 : \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = E_n \quad (6.65)$$

Импульс можно представить в виде

$$p = p + \delta p \quad (6.66)$$

где \$\delta p\$ - флуктуация импульса.

Посчитанная энергия есть средняя энергия, она соответствует флуктуациям частицы на дне ямы. То есть можно получить:

$$\frac{\Delta p^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \Rightarrow \Delta p = \frac{\pi \hbar}{a} \quad (6.67)$$

Неопределенность координаты равна \$a\$. Поэтому

$$\Delta p \Delta x = \pi \hbar \quad (6.68)$$

То есть мы получили соотношение неопределенности Гейзенберга.

## Потенциальная яма конечной глубины

Рассмотрим потенциальную яму конечной глубины:

Принцип решения аналогичен предыдущей задаче.

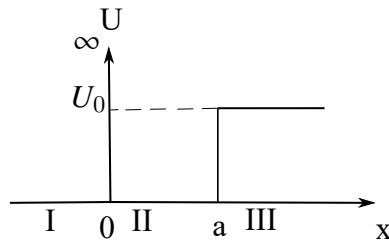


Рис. 6.4: Конечная яма конечной глубины

Получаем  $\psi_I = 0$ , вводим для каждой области

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \quad (6.69)$$

$$k_2^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} > 0 \quad (6.70)$$

Запишем уравнения для каждой области:

$$\ddot{\psi}_{II} + k_1^2 \psi_{II} = 0 \quad (6.71)$$

$$\ddot{\psi}_{III} - k_2^2 \psi_{III} = 0 \quad (6.72)$$

Получим общее решение равнения (6.72):

$$\psi_{III} = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x} \quad (6.73)$$

А решение уравнения (6.71) запишем в виде:

$$\psi_{II} = A \sin(k_1 x + \varphi) \quad (6.74)$$

Запишем граничные условия:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) = 0 \quad (6.75)$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \quad (6.76)$$

и потребуем гладкости функции в точке a:

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \quad (6.77)$$

Совокупность решений (6.72) - (6.74) и условий (6.75) - (6.77) даёт возможность полностью решить задачу. Дополнительное условие нормировки позволяет посчитать коэффициенты:

$$\int_0^\infty |\psi|^2 dx = 1 \quad (6.78)$$

## Лекция 7. Потенциальный барьер.

### Потенциальная яма конечной глубины

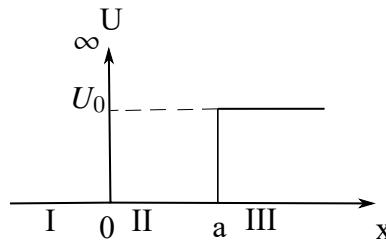


Рис. 7.1: Конечная яма конечной глубины

Введём три области и запишем для каждой области уравнение Шрёдингера и добавим граничные условия.

Для первой области решение известно:

$$\psi_I = 0 \quad (7.1)$$

Для второй области:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - E\psi_{II} = 0 \quad (7.2)$$

Введём величину:

$$k_2^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (7.3)$$

Решение уравнения можно записать в виде:

$$\psi_{II} = A \sin(k_2 x + \varphi) \quad (7.4)$$

Для третьей области:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} + (U_0 - E)\psi_{III} = 0 \quad (7.5)$$

Решение этого уравнения будет зависеть от знака величины  $(U_0 - E)$ . Рассмотрим оба случая.

Связанному состоянию частицы соответствует ситуация расположения энергии внутри ямы.

1.  $E > U_0$  Тогда вводим

$$k_3^2 = -\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \quad (7.6)$$

После чего уравнение (7.5) сводится к уравнению вида (7.2). Его решение:

$$\psi_{II} = C e^{ik_3 x} + D e^{-ik_3 x} \quad (7.7)$$

Распишем граничные условия:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) = 0 \Rightarrow \varphi = 0 \quad (7.8)$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \quad (7.9)$$

Условие гладкости (только одно, потому что одна стенка бесконечная):

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \quad (7.10)$$

Учтём также граничное условие на бесконечности. Решение представляет собой две волны, бегущих вправо и влево каждая. На бесконечности нет никаких источников волн. Поэтому на бесконечности должна быть только волна, распространяющаяся слева направо:

$$\psi_{III}(\infty) = Be^{-ik_3\infty} \Rightarrow C = 0 \quad (7.11)$$

Перейдём к граничным условиям:

$$A \sin(k_2 a) = D e^{-ik_3 a} \quad (7.12)$$

$$Ak_2 \cos(k_2 a) = -iDk_3 e^{-ik_3 a} \quad (7.13)$$

Отсюда получаем коэффициенты А и D и тем самым само решение.  
Один из результатов решения заключается в том, что даже если частица пролетает над ямой (её энергия больше порога ямы), она всё равно яму чувствует (волновая функция меняется - она уже не является свободной частицей).

Аналогичным образом можно рассмотреть задачу с ямой конечной глубины, обе стены которой высоты  $U_0$ :

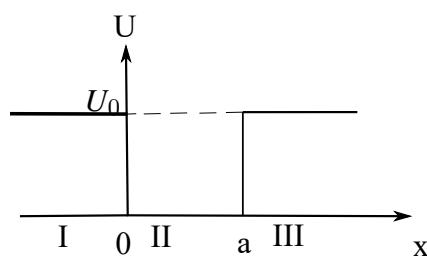


Рис. 7.2: Конечная яма конечной глубины

В этом случае появятся дополнительные уравнения на границе (условие гладкости). В такой ситуации частица почувствует яму, даже если пролетит над ней (в отличие от классического случая). Более того, появится отражённая волна.

Данной ситуации можно привести следующий аналог. Плоскопараллельная прозрачная пластина поставлена на пути светового пучка. В этом случае падающая волна частично

отразится, частично пройдёт (электромагнитная волна почивает на наличие слоя с другим показателем преломления).

2.  $E < U_0$  - частица находится в яме.

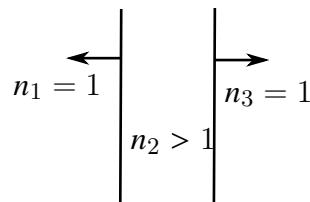


Рис. 7.3: Аналог движения частицы в яме конечной глубины

Тогда

$$k_3^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \quad (7.14)$$

Уравнение в третьей области примет вид:

$$\frac{d^2\psi_{\text{III}}}{dx^2} - k_3^2\psi_{\text{III}} = 0 \quad (7.15)$$

Решение данного уравнения в общем виде можно записать (исчезла мнимая единица):

$$\psi_{\text{III}} = Be^{k_3 x} + Ce^{-k_3 x} \quad (7.16)$$

На левой границе ничего не меняется:  $\varphi = 0$ .

На правой границе (на бесконечности) первое слагаемое решения (7.16) стремится к бесконечности, а второе - к нулю. Это противоречит физическим представлениям задачи, поэтому соответствующий коэффициент должен быть равен нулю:

$$x = \infty \Rightarrow B = 0 \quad (7.17)$$

Границные условия в точке a:

$$A \sin(k_2 a) = C e^{-k_3 a} \quad (7.18)$$

$$A k_2 \cos(k_2 a) = -C k_3 e^{-k_3 a} \quad (7.19)$$

Поделим уравнение (7.19) на (7.18):

$$k_2 \cdot a \cdot \operatorname{ctg}(k_2 a) = -k_3 a \quad (7.20)$$

Таким образом, мы получили уравнение относительно E. Решим уравнение графически:

Получаем дискретный набор решений данного уравнения (точки пересечения двух графиков и есть решения). Причём число этих состояний конечно и зависит от параметров.

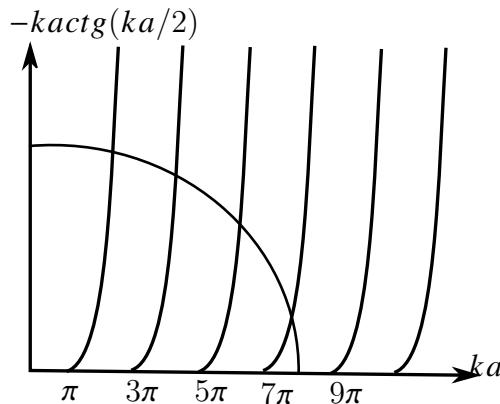


Рис. 7.4: Графический способ решения уравнения

ров задачи ширины и глубины ямы).

Проанализируем решения. Из свойств котангенса следует

$$\frac{\pi}{2} < k_2 a < \pi \quad (7.21)$$

Следующее решение лежит уже в другой четверти:

$$\frac{3\pi}{2} < k_2 a < 2\pi \quad (7.22)$$

и т.д.

Отсюда можно сделать вывод, что условие существования хотя бы одного решения можно записать в виде:

$$k_2 a > \frac{\pi}{2} \quad (7.23)$$

перейдём к энергии:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} a > \frac{\hbar^2}{4} \quad (7.24)$$

Тогда:

$$U_0 > E > \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (7.25)$$

$$U_0 > \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (7.26)$$

Отсюда получаем условие наличия хотя бы одного связанного состояния частицы в яме:

$$U_0 a^2 > \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m} \quad (7.27)$$

Как известно, протон и нейтрон могут образовать ядро дейтерия. Попробуем заменить протон на нейтрон. Сила взаимодействия для нейтрона практически не отличается от силы взаимодействия протона. Однако ядра с двумя протонами не существует. Это свя-

зано с тем, что протон и нейтрон обладают разным потенциалом взаимодействия. Разница небольшая, однако оказывается, что для системы протон-нейтрон условие (7.27) выполняется (в соответствующей потенциальной яме может существовать только один уровень), а для системы нейтрон-нейтрон - нет (нет связанного состояния двух нейтронов).

Нарисуем вид волновой функции:

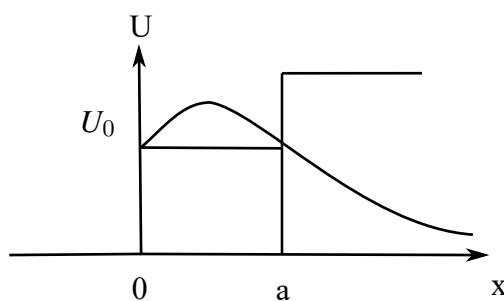


Рис. 7.5: Волновая функция в случае ямы конечной глубины

Заметим, что так как  $\psi_{III} \neq 0$ , то и вероятность нахождения частицы в запрещённой (с классической точки зрения) области  $(a, \infty)$  не равна нулю.

## Потенциальный барьер и туннельный эффект

Рассмотрим потенциальный барьер:

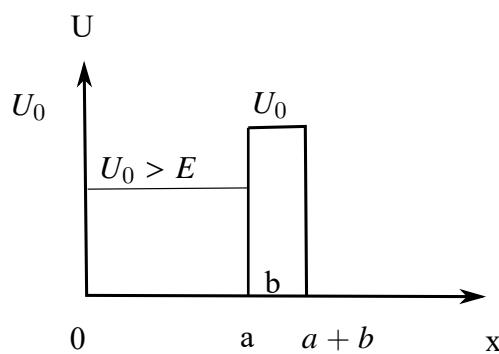


Рис. 7.6: Потенциальный барьер

Рассмотрим ситуацию  $U_0 > E$ .

Предельный случай  $b \rightarrow \infty$  сводит задачу к предыдущей.

Заметим, что из-за появления новой границы в решении появится отражённая волна (отражение от правой границы барьера). Соответствующая часть решения, которая в прошлой

задаче являлась нефизичной (и потому была из решения удалена) уже будет присутствовать. То есть

$$\psi_{\text{III}} = Be^{k_3 x} + Ce^{-k_3 x} \quad (7.28)$$

Решение в четвёртой области будет таким же, как и внутри ямы, но с другими коэффициентами. Учитывая, что параметры  $k_2 = k_4$ , получим

$$\psi_{\text{IV}} = D_1 e^{ik_2 x} + D_2 e^{-ik_2 x} \quad (7.29)$$

На бесконечности нет отражающей стенки. Поэтому слагаемое  $D_1 e^{ik_2 x} = 0$ .

Далее можно записать условия на непрерывность и гладкость функции на двух границах. В результате получим систему уравнений, из которых можно определить коэффициенты. Анализ полученного решения показывает, что для частицы появляется вероятность оказаться за барьера. То есть, частица может туннелировать сквозь барьер с некоторой ненулевой вероятностью, которая определяется коэффициентом  $D_2$ .

**Проницаемость барьера** равна отношению вероятности найти частицу вне ямы к вероятности найти частицу в яме:

$$D = \frac{|D_2|^2}{|A|^2} \quad (7.30)$$

Получим формулу для проницаемости барьера в случае, если барьер плохо проницаемый (вероятность прохождения мала).

Будем считать, что  $b$  - большое (широкий барьер). В этом случае отражённой волной можно пренебречь.

Тогда ослабление волновой функции будет

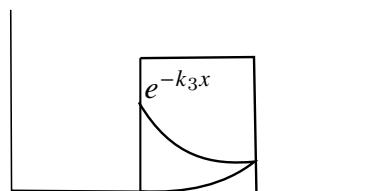


Рис. 7.7: Потенциальный барьер

$$\left|e^{-k_3 b}\right|^2 = e^{-2k_3 b} = e^{-2\sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}} \cdot b} \quad (7.31)$$

Таким образом, мы получили грубую оценку проницаемости барьера (даёт ответ с хорошей точностью в случае малого числа).

Заметим, что

$$\sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}} = \lambda_B^{-1} \quad (7.32)$$

Рассмотрим случай  $U_0 \neq \text{const}$ . Тогда можно разбить барьер на множество слоёв и предположить, что внутри каждого слоя потенциал постоянен. Тогда получим формулу вида:

$$D \approx e^{-2 \int_a^b \frac{\sqrt{2m(U_0(x)-E)}}{\hbar} dx} \quad (7.33)$$

При этом потенциал должен быть медленной функцией  $x$  по сравнению с длиной волны де Броиля.

## Примеры туннельного эффекта

Туннельному эффекту аналогичен эффект полного внутреннего отражения. При падении света из среды с показателем преломления  $n_1$  в среду с меньшим показателем преломления, то при определённом угле возникает полное внутренне отражение (электромагнитное излучение полностью отражается от границы).

Однако, следует учитывать, что при полном внутреннем отражении волна во второй среде также присутствует (это будет затухающая волна с характерным масштабом, равным длине волны). Чтобы обнаружить затухающую волну, пронаходим явление нарушенного полного внутреннего отражения.

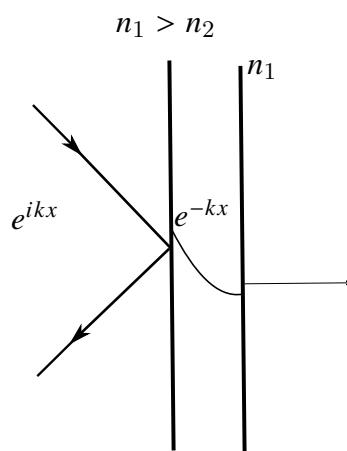


Рис. 7.8: Нарушенное полное внутреннее отражение

Для этого поместим ещё одну среду с показателем преломления  $n_1$  (причём ширина зазора между средами должна быть порядка длины волны). Тогда затухающее решение продлится до новой границы, а на самой границе возникнет бегущая волна (её можно зарегистрировать). Данное явление и будет аналогом туннелирования через барьер (однако следует учитывать, что в одном случае речь идёт о электромагнитной волне, а в другом - о волне вероятности).

Рассмотрим несколько примеров проявления туннельного эффекта.

**Пример 1.** Альфа-распад ядер.

Решение задачи предполагает решение уравнения Шрёдингера. Для этого рассмотрим потенциал взаимодействия альфа-частицы и ядра.

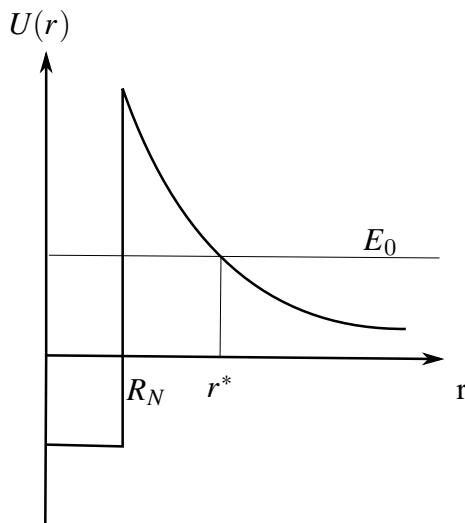


Рис. 7.9: Потенциал взаимодействия

На Рис. 7.9  $R_N$  - радиус ядра. При  $r < R_N$  взаимодействие альфа-частицы с ядром-остатком носит характер ядерного взаимодействия и образуется глубокая яма. Если альфа-частица начинает удаляться от ядра, то между ней и остаточным ядром возникает кулоновское взаимодействие (так как и частицы, и остаточное ядро заряжены). При этом частица считается свободной в области  $r > r^*$ , если энергия частицы  $E_0$  больше, чем потенциал взаимодействия (см Рис. 7.9).

Таким образом, в рамках описанного формализма задача свелась к задаче о туннельном эффекте (частица, находящаяся в связанном состоянии с ядром, туннелирует через барьер).

Запишем потенциал

$$U(r > R_N) = \frac{2e^2(Z-2)}{r} \quad (7.34)$$

где  $Z$  - заряд ядра в целом. Множители 2 и  $(Z-2)$  появляются, так как заряд альфа-частицы равен двум.

Посчитаем, сколько даёт кулоновское взаимодействие на расстоянии порядка ядерного. Это даст высоту барьера.

Подставим в (7.34)  $r = R_N$  (порядка 1 Фм) и зарад  $Z$ . Для ядра  $^{210}_{84}P_0$  получим  $U(r = R_N) = 23$  МэВ. Это больше энергии наблюдаемых альфа-частиц, поэтому можно сделать вывод, что приближение является корректным (явление распада можно описывать как туннельный эффект).

Запишем формулу для проницаемости барьера:

$$\ln D = -2 \int_{R_N}^{R^*} dr \frac{\sqrt{2m_\alpha(U_0(r) - E)}}{\hbar^2} \quad (7.35)$$

где  $R^*$  - условная граница потенциала (возникает уз условия  $E_0 = U$ ).

Взяв интеграл, получим:

$$\ln D = \frac{-2\pi e^2 Z'}{\hbar} \sqrt{\frac{2m_\alpha}{E}} + \frac{8}{\hbar} \sqrt{e^2 Z' R_N m_\alpha} \quad (7.36)$$

где  $Z' = Z - 2$ .

Проницаемость  $D$  - это вероятность того, что частица появится. Можно показать, что  $D \ll 1$ . Однако, альфа-распад - явление наблюдаемое, вероятность должна быть близка к единице. Для обоснования данного факта считают, что вероятность обнаружения частицы  $p$  определяется как

$$1 = p = D \cdot n \quad (7.37)$$

где  $n$  - число столкновений (можно представить, что частица - это некий шарик, находящийся в яме).

Считаем, что период (время, через которое альфа-частица сталкивается со стенкой):

$$\tau = \frac{R_N}{c} \quad (7.38)$$

Число столкновений должно быть  $n = \frac{1}{D}$ . Тогда полное время альфа-распада:

$$\tau_\alpha = \tau \cdot n = \frac{\tau}{D} \quad (7.39)$$

Отсюда можно получить универсальную формулу для времени альфа распада:

$$\log_{10} \tau_\alpha = \frac{148}{\sqrt{E/\text{МэВ}}} - 53,5 \quad (7.40)$$

**Пример 2.** Туннельный эффект используется в устройствах записи и хранения информации.

Устройство записи и хранения информации можно представить следующим образом. Поток данных распространяется по металлическому проводнику. за ним расположены окисный слой, непроницаемый для электронов и некая ячейка (яма конечной глубины в полупроводнике), в которую может попасть электрон. Если слой окисла широкий, то в ячейке накапливается заряд, который даёт единицу информации.

Если в ячейке уже есть заряд, то подав напряжение на всю конструкцию, можно умень-

шить ширину запирающего слоя, так, чтобы вероятность туннельного тока через окисный слой была не нулевой (вероятность должна быть небольшой, чтобы не весь ток не перешёл в ячейку). Тогда возникает ток, который можно зарегистрировать. Обратно, если нужно записать информацию, аналогичным способом создают ток в обратную сторону.

**Пример 3.** Туннельный микроскоп.

На некоторой поверхности расположен заряд. Подведём острие к поверхности. Если расстояние между остриём и поверхностью будет достаточно маленьким (вероятность протекания тока через промежуток будет ненулевой), то возникает туннельный эффект (возникший ток можно измерить). Оказывается, для проявления туннельного эффекта расстояние между острием и поверхностью должно быть порядка одного ангстрема.

Таким образом, туннельный микроскоп позволяет с разрешением порядка ангстрема исследовать структуру проводящих поверхностей.

## Лекция 8. Движение в центральном поле.

### Движение в центральном поле

Рассмотрим движение заряженной частицы в центральном поле ( $U(r)$  зависит только от радиус-вектора  $r$  и является центрально-симметричным). Частный случай данной задачи - движение электрона в кулоновском поле протона. Причём в таких задачах мы считаем, что центр с зарядом  $Z$  является неподвижным (то есть имеет большую массу).

Запишем уравнение Шрёдингера (потенциал является кулоновским):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{Ze^2}{r}\psi = E\psi \quad (8.1)$$

При этом волновая функция является функцией координат  $\psi(r, \theta, \varphi)$  или  $\psi(x, y, z)$ . Задача является центрально-симметричной, поэтому будет решать задачу в координатах  $(r, \theta, \varphi)$ . Распишем оператор  $\Delta$  в сферических координатах.

Для этого запишем

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \quad (8.2)$$

$$rdr = xdx \Rightarrow \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} \quad (8.3)$$

Вычислим частные производные:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial r} \quad (8.4)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{x^2}{r^3} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{x^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \quad (8.5)$$

Аналогично можно получить  $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ ,  $\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ .

Тогда можно записать выражение для координатной части оператора Лапласа:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \quad (8.6)$$

В данной задаче будет искать решение, не зависящее от  $\theta$  и  $\varphi$  (решение, имеющее центр симметрии). Тогда вместо оператора Лапласа можно использовать только его координатную часть (8.6).

Подставим (8.6) в (8.1):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi}{dr} \right) - \frac{Ze^2}{r}\psi = E\psi \quad (8.7)$$

Получаем дифференциальное уравнение для волновой функции в случае центральной симметрии.

Введём параметры:

$$\beta = \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \quad (8.8)$$

и

$$k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \quad (8.9)$$

Тогда уравнение запишем в виде:

$$\psi'' + \frac{2}{r}\psi' + \frac{\beta}{r}\psi = k^2\psi \quad (8.10)$$

Так как потенциал кулоновский ( $U \sim \frac{1}{r}$ ), будем искать решение в виде функции, которую можно представить в виде произведения некоторой функции и  $\frac{1}{r}$ :

$$\psi(r) \frac{u(r)}{r} \quad (8.11)$$

Тогда

$$\psi' = \frac{u'}{r} - \frac{u}{r^2} \quad (8.12)$$

и

$$\psi'' = \frac{u''}{r} - \frac{2}{r^2}u' + \frac{2}{r^3}u \quad (8.13)$$

Подставим полученные выражения для производных в (8.10). Тогда получим уравнение для функции  $u$ :

$$u'' + \beta \frac{u}{r} = k^2 u \quad (8.14)$$

Исследуем асимптотику решения. Рассмотрим случай  $r \rightarrow \infty$ . Тогда уравнение сводится к уравнению вида

$$u'' = k^2 u \quad (8.15)$$

его решение

$$u_\infty = A e^{kx} + B e^{-kx} \quad (8.16)$$

Заметим, что на бесконечности  $A e^{kx} \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} \infty$ . Поэтому стоит положить  $A = 0$ .

Таким образом, функцию  $u$  можно искать в виде:

$$u = e^{-kr} \cdot f(r) \quad (8.17)$$

где  $f(r)$  - некая медленная функция.

Посчитаем производные:

$$u' = -k e^{-kr} \cdot f(r) + f' e^{-kr} \quad (8.18)$$

$$u'' = k^2 e^{-kr} - 2k e^{-kr} f' + f'' e^{-kr} \quad (8.19)$$

Подставим полученные производные в (8.14):

$$f'' - 2k f' + \frac{\beta}{r} f = 0 \quad (8.20)$$

Решением этого уравнения является полином:

$$f(r) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m r^m \quad (8.21)$$

Подставим данное решение в (8.20):

$$\sum_{j=1}^{\infty} b_j r^j = 0 \quad (8.22)$$

Полученное уравнение должно выполняться для любого  $r^j$ . Это так, если выполнено следующее уравнение на коэффициенты:

$$a_{n+1}(n+1)n - 2ka_n \cdot n + \beta a_n = 0 \quad (8.23)$$

отсюда получим рекуррентную формулу для коэффициентов:

$$a_{n+1} = a_n \frac{2kn - \beta}{n(n+1)} \quad (8.24)$$

Рассмотрим два случая:

1. Существует такое  $n$ , что  $2kn - \beta = 0$ . Тогда ряд обрывается, все следующие коэффициенты равны нулю.
2. Не существует такого  $n$ , для которого  $2kn - \beta = 0$ .

Так как ряд не обрывается, можно записать  $a_{n+1} = a_n \frac{2k-\beta/n}{n+1} \approx a_n \frac{2k}{n+1}$  при  $n \rightarrow \infty$ . Разложение в ряд экспоненты:

$$e^\alpha = \sum_n \frac{1}{n!} \alpha^n \quad (8.25)$$

Обозначим  $\alpha = 2kr$ . Тогда отношение членов ряда равно

$$\frac{b_{n+1}}{b_n} = \frac{2k}{n+1} \quad (8.26)$$

При этом  $\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{2k}{n+1}$ . То есть, можно записать

$$f(r) \propto e^{2kr} \quad (8.27)$$

Тогда для исходной волновой функции получим

$$\psi(r) = \frac{e^{2kr} e^{-kr}}{r} = \frac{e^{kr}}{r} \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} \infty \quad (8.28)$$

То есть, если ряд не обрывается, то уравнение не имеет решения (частица улетит).

Значит, рассмотрим ситуацию 1) - ряд обрывается. Тогда

$$k_n = \frac{\beta}{2n} \quad (8.29)$$

Значит, условие обрыва ряда даёт дискретный уровень энергии:

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{me^4}{2\hbar^2} = -\frac{RZ^2}{n^2} \quad (8.30)$$

Запишем полученное частное решение, не зависящее от углов:

$$\psi_n(r) = \frac{1}{r} e^{-kr} \sum_{m=1}^n a_m r^m \quad (8.31)$$

Тогда волновая функция первого волнового состояния:

$$\psi_1 = a_1 e^{-kr} \quad (8.32)$$

Посчитаем радиус атома. Определим радиус атома как расстояние, для которого вероятность  $P$  обнаружить на этом радиусе электрон максимальна. Тогда

$$P dr = |\psi|^2 4\pi r^2 dr \quad (8.33)$$

Найдём максимум из уравнения  $\frac{dP}{dr} = 0$ . В результате получим, радиус первой орбиты (координата, в которой электрон находится с большей вероятностью) равен радиусу Бора  $r = r_a$ .

В общем виде лапласиан в сферических координатах имеет вид:

$$\Delta = \Delta_r + \frac{\nabla_{\theta,\varphi}^2}{r^2} \quad (8.34)$$

где  $\Delta_r$  - координатная часть, а

$$\nabla_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad (8.35)$$

Решим стационарное уравнение Шрёдингера с учётом зависимости от углов. Будем искать

решение в виде:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (8.36)$$

Подставим такой вид решения в уравнение Шрёдингера:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_0}{\hbar^2} r^2 (E - U) = \frac{1}{Y} \nabla_{\theta, \varphi}^2 Y = \lambda \quad (8.37)$$

обе части уравнения (8.37) можно приравнять некоторой постоянной  $\lambda$ , так как левая часть уравнения зависит только от  $r$ , правая - только от углов (при этом само равенство должно выполняться в любой точке).

В итоге получаем два отдельных уравнения. Запишем угловое уравнение:

$$\nabla_{\theta, \varphi}^2 Y = \lambda Y \quad (8.38)$$

Будем искать решение в виде:

$$Y = P(\theta)\Phi(\varphi) \quad (8.39)$$

Подставим вид решения в уравнение (8.38). Аналогично (8.37) произведём разделение переменных (введём новую константу  $\mu$ ) и получим два уравнения:

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + \mu^2\Phi = 0 \quad (8.40)$$

и

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{dP}{d\theta} \right) + \left( \lambda - \frac{\mu^2}{\sin^2\theta} \right) P = 0 \quad (8.41)$$

Уравнение (8.40) имеет решение:

$$\Phi(\varphi) = A e^{i\mu\varphi} + B e^{-i\mu\varphi} \quad (8.42)$$

Заметим, что  $\varphi$  - периодическая переменная. Значит, при изменении  $\varphi$  на  $2\pi$  решение должно переходить само в себя. Отсюда следует, что

1.  $\mu$  - целое

Тогда решение (с учётом нормировки):

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, m = 0, \pm 1, \dots \quad (8.43)$$

Решим уравнение (8.41) путём введения новой переменной  $\xi = \cos\theta$ . Записав (8.41) относительно новой переменной, получим:

$$\frac{d}{d\xi} \left( (1 - \xi^2) \frac{dP}{d\xi} \right) + \left( \lambda - \frac{m}{1 - \xi^2} \right) P = 0 \quad (8.44)$$

Данное уравнение имеет решение в виде присоединённых функций Лежандра:

$$P_l^{(m)}(\xi) = \frac{1}{2^l l!} (1 - \xi^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{d\xi^{l+m}} (\xi^l - 1)^l \quad (8.45)$$

Причём

$$\lambda = l(l+1), \quad l > 0, \quad l - \text{целое} \quad (8.46)$$

и

$$m = -l \dots 0 \dots l \quad (8.47)$$

Таким образом, получены выражения для угловой части решения. Получим радиальную часть решения следующим образом.

Зададим  $l = 1$  тогда  $m = \pm 1, 0$ . Отсюда появляется уравнение для радиальной части, содержащее 1 (но не содержащее  $m$ ).

Уравнение для радиальной части будет аналогично уравнению, полученному без учёта угловой части, но с другим потенциалом. Отличие будет в том, что решение будет содержать  $n$  (индекс, определяющий номер уровня), который представлен в виде:

$$n = n_r + l + 1, \quad n_r \geq 0, \quad l < n_r \quad (8.48)$$

Таким образом, из решения основного уравнения для радиальной части появится дискретный набор уровней. Причём энергия  $n$ -го уровня будет иметь тот же вид, что и для сферически-симметричного решения:

$$E_n = -\frac{RZ^2}{n^2} \quad (8.49)$$

где  $n$  удовлетворяет (8.48).

Если  $n = 2$ , то  $n_r = 1, 2$ . Тогда возможны ситуации  $n = 2, n_r = 1, l = 1, m = 0, \pm 1$  и  $n = 2, n_r = 2, l = 0, m = 0$ . То есть,  $n = 2$  соответствует четыре волновых функции, которые описывают различные состояния с одной и той же энергией.

Запишем оператор углового момента:

$$\hat{M} = [\hat{r}, \hat{p}] = \begin{vmatrix} i & j & k \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix}$$

Отсюда можно получить оператор проекции углового момента на оси  $\hat{M}_z, \hat{M}_x, \hat{M}_y$ :

$$\hat{M}_z = -i\hbar \frac{d}{d\varphi} \quad (8.50)$$

$$\hat{M}_x = \frac{\hbar}{i} \left( \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + ctg\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \quad (8.51)$$

$$\hat{M}_y = \frac{\hbar}{i} \left( \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - ctg\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \quad (8.52)$$

Построим оператор:

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta,\varphi}^2 \quad (8.53)$$

Заметим, что этот самый оператор стоит в уравнении Шрёдингера.

Таким образом, для электрона в поле заряженного центра волновая функция представлена радиальной частью и угловой частью, причём угловая часть связана с моментом импульса движения электрона. Если момент импульса равен нулю, то получаем сферически-симметричное решение. Можно доказать, что величины  $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$  не коммутируют друг с другом. То есть, нельзя одновременно измерить две проекции момента импульса. При этом  $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$  коммутируют с  $\hat{K}_r, U$ , поэтому в уравнении Шрёдингера производится разделение переменных на угловые и радиальную части (операторы коммутируют  $\Rightarrow$  физические величины, которые они определяют, могут измеряться одновременно и друг от друга не зависят).

Определим физический смысл введенных выше чисел  $n, n_r, l, m$ .  $m$  появилось в уравнении для оператора проекции  $\hat{M}_z$ . Выше было доказано, что проекции углового момента на ось  $z$  могут принимать значения, кратные  $\hbar$  ( $m$  - есть кратность).  $l$  определяет полный угловой момент электрона, то есть  $l$  соответствует оператору  $\hat{M}^2$ , причём собственные значения этого оператора равны  $\hbar^2 l(l+1)$ . То есть, проекция углового момента на ось  $z$  квантуется:

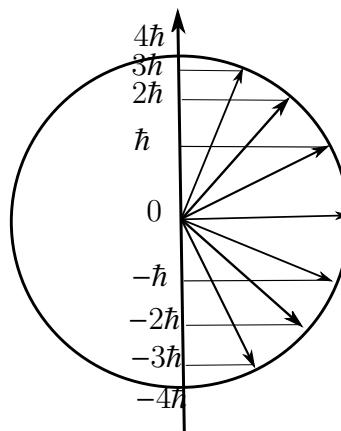


Рис. 8.1: Квантование проекции углового момента на ось  $z$

Полный угловой момент даёт проекции на ось  $z$ . Длина этой проекции определяется числом  $m$  и эти проекции могут меняться  $m = -l, \dots, l$ .

Заметим, что максимальная величина проекции углового момента:

$$M_z^2 \Big|_{max} = m^2 \hbar^2 = l^2 \hbar^2 \quad (8.54)$$

При этом

$$M^2 = \hbar^2 l(l + 1) \quad (8.55)$$

то есть квадрат углового момента всегда больше, чем его проекция на ось z. В противном случае, если бы  $M^2 = M_z^2$ , выполнялось бы  $M_x^2 = M_y^2 = 0$ , то есть все три проекции были бы известны точно, что невозможно вследствие описанного выше.

В качестве аналогии можно привести волчок с длиной  $\sqrt{M^2}$ . Волчок приведён в движение. Если угловой момент направлен строго вертикально, то  $x = y = 0$ , вращения не будет. При вращении проекции на плоскость xy не определены (нельзя определить, чему равны в каждый момент времени  $M_x$  и  $M_y$ ).

## Призма Николя

Рассмотрим принцип действия призмы Николя как аналог влияния выбора системы координат на результат измерения в квантовой физике.

Призма Николя составлена из двух призм с разными показателями преломления. Показатель преломления для обыкновенной волны на границе обеспечивает полное внутреннее отражение, а для волны с определённым направлением поляризации Показатели преломления выбраны так, чтобы обеспечить поляризационное деление (пускаем на призму пучок с определённой поляризацией. При этом часть пучка, который имеет поляризацию одного типа, идёт в одну сторону, другая часть идёт в другую сторону).

Аналогично процедура измерения (ввод системы координат) влияет на результат измерения момента импульса в квантовой физике.

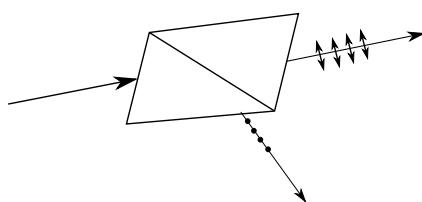


Рис. 8.2: Призма Николя

Можно сказать, что в данном процессе вводится базис. Мы раскладываем произвольную поляризацию по двум её составляющим. Однако, если мы начнём вращать призму, базис изменится (процедура измерения будет производится в другой системе координат). Таким образом, в оптике процедура измерения может влиять на результат. При этом состояние пучка на входе остаётся одним и тем же, а состояния поляризации пучков на выходе зависят от поворота призмы.

## Квантовые числа

Рассмотрим

$$M_z = m \cdot \hbar, m = 0, \pm 1, \dots, \pm l \quad (8.56)$$

то есть возможно  $2l + 1$  значений для  $M_z$ . Посчитаем среднее:

$$\langle \hat{M}_z^2 \rangle = \hbar^2 \frac{l^2 + (l-1)^2 + \dots + (-l)^2}{2l+1} = \frac{\hbar^2}{3} l(l+1) \quad (8.57)$$

Так как нет никакого выделенного направления (нет системы координат), должно выполняться тождество:

$$\langle \hat{M}_x^2 \rangle = \langle \hat{M}_y^2 \rangle = \langle \hat{M}_z^2 \rangle \quad (8.58)$$

Тогда среднее от квадрата углового момента

$$\langle \hat{M}^2 \rangle = \langle \hat{M}_x^2 \rangle + \langle \hat{M}_y^2 \rangle + \langle \hat{M}_z^2 \rangle = \hbar^2 l(l+1) \quad (8.59)$$

Рассмотрим электрон в центральном или кулоновском поле. Чтобы точно посчитать волновую функцию, нужны индексы  $n, n_r, l, m$ . Поэтому эти индексы называются квантовыми числами.

**$n$  - главное квантовое число** определяет энергию состояния

**$n_r$  - радиальное квантовое число** (связано с радиальной компонентой)

**$l$  - угловое квантовое число** связано с угловым моментом системы

**$m$  - проекция углового момента.**

Задав три числа  $n, l, m$ , мы однозначно зададим состояние системы (то есть определим волновую функцию системы).

Рассмотрим примеры.

Основное состояние атома водорода можно задать числами  $n = 1l = 0(s)m = 0$ . Оно сферически симметрично, так как угловой момент равен нулю.

Состояния с  $l = 0$  называют s-состояниями, состояния с  $l = 1$  - p-состояниями,  $l = 2 \rightarrow d$  состояния,  $l = 3 \rightarrow f$  состояния.

$n = 2 \ l = 0(s), \ m = 0$

$n = 2 \ l = 1(p), \ m = 0, \pm 1$

Введём понятие вырожденных уровней. Уровни **вырождены**, если их волновые функции различны, а энергии одинаковы.

Для каждого  $l$  есть  $2l + 1$  проекций, поэтому для каждого  $l$  есть  $2l + 1$  волновых функций.

При этом  $l$  лежит в диапазоне  $[0, n - 1]$ . Посчитав сумму, получим кратность вырождения:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2 \quad (8.60)$$

Можно доказать, что при учёте дополнительных взаимодействий внутри атома вырождение может сниматься.

## Лекция 9. Магнитный момент. Спин.

### Магнитный момент атома

У атома есть механический момент (масса, движущаяся по окружности). Однако, существует ещё и заряд, который движется по окружности. Это равносильно протеканию тока. Ток генерирует магнитное поле, поэтому у атома (как следствие существования орбитального момента) существует и магнитный момент.

Запишем угловой момент:

$$\vec{L} = m[\vec{r} \times \vec{v}] \quad (9.1)$$

Магнитный момент по определению:

$$\vec{P}_m = \frac{1}{c} i \vec{S} = \frac{1}{c} \frac{qv}{2\pi r} \pi r^2 \vec{n} \quad (9.2)$$

где  $\vec{S}$  - ток.

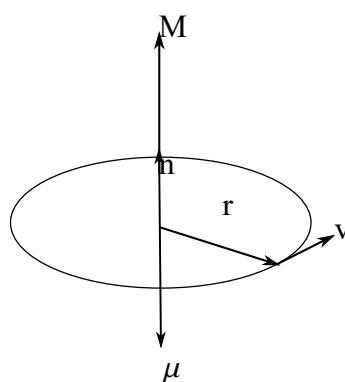


Рис. 9.1: Иллюстрация к расчёту магнитного момента

Учтём, что  $q$  - заряд электрона. Тогда получим

$$\vec{P}_m = -\frac{e}{2c} rv \vec{n} = -\frac{e}{2mc} m [\vec{r} \times \vec{v}] \quad (9.3)$$

Таким образом, связь магнитного и углового моментов электрона

$$\vec{P}_m = -\frac{e}{2mc} \vec{L} \quad (9.4)$$

Рассмотрим проекцию на ось  $z$ :

$$P_{m_z} = -\frac{e}{2mc} \vec{L}_z \quad (9.5)$$

Перейдём к операторным величинам:

$$\hat{P}_m = -\frac{e}{2mc}\hat{L} \quad (9.6)$$

$$\hat{P}_{m_z} = -\frac{e}{2mc}\hat{L}_z \quad (9.7)$$

Собственные значения оператора  $\hat{L}_z$  известны, поэтому угловой момент

$$\mu_{l_z} = -\frac{\hbar e}{2mc}m_l \quad (9.8)$$

Причём величина

$$\mu_B = \frac{\hbar e}{2mc} \approx 0.9 \cdot 10^{-20} \text{ эрг/Гс} \quad (9.9)$$

называется магнетоном Бора.

Таким образом,

$$\mu_{l_z} = -\mu_B m_l \quad (9.10)$$

где  $m_l$  - так называемое магнитное квантовое число, а  $\mu_{l_z}$  - величина проекции магнитного момента на ось z.

Заметим, что собственные функции операторов  $\hat{P}_m$  и  $\hat{L}$  а также операторов  $\hat{P}_{m_z}$  и  $\hat{L}_z$  совпадают.

Из (9.10) можно получить модуль углового момента:

$$|\mu_l| = \mu_B \sqrt{l(l+1)} \quad (9.11)$$

Таким образом, мы получили простейшую модель магнетизма. Элементарным объектом, определяющим наличие элементарного магнитного поля, является атом. Суммируя магнитный момент по большому числу атомов, получим макроскопические магнитные явления.

Для измерения магнитного поля его нужно поместить в однородное магнитное поле Н. Помещая атом в магнитное поле, мы тем самым производим процедуру измерения - появляется ось z. Магнитный момент атома начинает взаимодействовать с магнитным полем. Вследствие этого электрон получает дополнительную энергию, равной (согласно классической теории):

$$\Delta u = -\vec{\mu} \vec{B} \quad (9.12)$$

Перейдя к квантовому представлению, получим:

$$\Delta u = -\mu_z B = \mu_B B \cdot m_l \quad (9.13)$$

Таким образом, сдвиг зависит от проекции магнитного момента на направление магнит-

ногого поля. Например, если проекция магнитного момента перпендикулярна магнитному полю, то энергия системы не увеличится, так как взаимодействие отсутствует.  
Рассмотрим энергию  $n$ -го уровня атома водорода

$$E_n = -\frac{Rz^2}{n^2} \quad (9.14)$$

где  $n$  - главное квантовое число  $n = n_r + l + 1$ . В эту формулу не входит магнитное квантовое число, значит, уровни вырождены (все электроны с одним и тем же  $n$ , имеют одну и ту же энергию). Однако, в случае помещения атома в магнитное поле появляется добавка к энергии, которая определяется проекцией магнитного момента на ось  $z$ . Таким образом, происходит снятие вырождения. Вырожденный уровень расщепляется на набор эквидистантных уровней. Отсюда можно получать некоторые результаты. Например, в результате проведения эксперимента получили пять уровней. При этом должно выполняться  $5 = 2l + 1$ , значит  $l = 2$ .

На основе того же опыта с магнитным полем можно измерить величину поля  $B$  (например, спектроскопически рассчитав расстояние между уровнями).

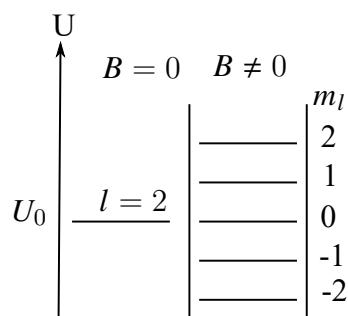


Рис. 9.2: Расщепление уровней в магнитном поле

## Опыт Штерна-Герлаха

Отметим, что только по проекции магнитного момента атомов, помещённых в однородное магнитное поле, нельзя определить состояния атомов. Так как в этом случае потенциал равен произведению констант:

$$U = -\mu B(z) \quad (9.15)$$

Тогда сила, действующая на атом:

$$F = -\nabla U = 0 \quad (9.16)$$

То есть внутренняя энергия электрона в такой системе изменяется, но сила на него не действует и движение (в классическом смысле) не изменяется в магнитном поле.

Однако, можно разделить в пространстве атомы с разными значениями проекции магнитного момента. Эта идея осуществилась в опытах Штерна и Герлаха. В опытах использовалось неоднородное магнитное поле. Тогда градиент потенциала (и сила) уже не равен нулю.

Для создания неоднородного магнитного поля использовались два магнита - плоский и клиновидный. Поле в зазоре между магнитами будет неоднородным.

Тогда сила, действующая на пролетающий между магнитами атом

$$\vec{F} = -\mu_x \frac{\partial B}{\partial x} - \mu_y \frac{\partial B}{\partial y} - \mu_z \frac{\partial B}{\partial z} \quad (9.17)$$

В контексте геометрии установки поле было однородно по координатам  $x$  и  $y$ . То есть  $\vec{F} = -\mu_z \frac{\partial B}{\partial z}$ . Формально можно записать

$$F_z = A\mu_z \quad (9.18)$$

где  $A$  - коэффициент.

Таким образом, в зависимости от  $m_l$  сила будет разной. Далее можно записать классическое уравнение движения атома с учётом действующей на него силы. Получим некоторую зависимость от  $m_l$ . Если  $m_l = 0$ , то атом полетит прямо без отклонений. Если  $m_l = \pm 1$ , атом отклонится и на экране появится точка. Таким образом, число точек на экране равно числу проекций магнитного момента.

Рассмотрим данный эксперимент с атомом водорода. Если атом водорода в основном состоянии, то  $n = 1 \quad l = 0 \quad m_l = 0$  и расщепления быть не должно. Если  $n = 2 \quad l = 0, 1 \quad m_l = 0, \pm 1$  - должно быть три точки.

Однако, в проведённом опыте для основного состояния атома водорода на экране было две точки.

## Спин электрона

Чтобы объяснить полученный экспериментальный результат, ввели понятие спина электрона. Для атома водорода произошло расщепление в магнитном поле. Значит, у этого атома есть какой-то момент (обозначим его квантовое число  $s$ ). Тогда, так как произошло расщепление на две компоненты, можно записать:  $2s + 1 = 2 \Rightarrow s = 1/2 \Rightarrow m_s = \pm 1/2$ . То есть, дополнительный угловой момент электрона равен  $1/2$ .

Будем считать, что речь идёт об угловом моменте. Значит, для него сохраняются правила работы с моментами. Тогда для квантового числа можно записать:

$$s^2 = \hbar^2(s + 1)s = \frac{3}{4}\hbar^2 \quad (9.19)$$

и проекция спинового момента на ось z:

$$s_z = \pm \frac{\hbar}{2} \quad (9.20)$$

В качестве классической аналогии существования спина электрона можно привести модель шарика, вращающегося вокруг своей оси. Однако данное представление противоречит физическим представлениям об электроне (чтобы получить такой угловой момент, шарик должен вращаться со скоростью, большей скорости света).

Таким образом, спин - релятивистская сущность (возникающая вследствие релятивистской теории). Для спина нет классического аналога.

Рассмотрим систему в основном состоянии ( $l = 0$ ) и поместим её в однородное магнитное поле. Тогда получим расщепление по проекции спинового числа, причём это расщепление будет точно таким же, как и расщепление при  $l \neq 0$ . Это означает, что  $\mu_s = \mu_B$  (так как расстояние между уровнями равно произведению магнитного поля на проекцию углового момента). Однако, проекция магнитного спинового момента на ось z:

$$\mu_{s_z} = -\frac{e}{2mc} s_z = \pm \frac{1}{2} \mu_B \quad (9.21)$$

так как  $s_z = 1/2$ . Получаем противоречие. Значит:

$$\frac{|\mu_{s_z}|}{|s_z|} = -2 \frac{e}{2mc} \quad (9.22)$$

Значит, длина вектора магнитного момента, связанного со спином, в два раза больше (в относительных единицах), чем для углового, так как для углового момента можно записать:

$$\frac{|\mu_{l_z}|}{L_z} = -\frac{e}{2mc} \quad (9.23)$$

В релятивистской квантовой теории Дирака этот факт (как и спин) появляется сам собой. С точки зрения нерелятивистской квантовой физики множитель 2 - некоторый постулат.

## Опыт Эйнштейна - де Хааза

Намагниченный стержень подвешивается на невесомой нити. Устанавливается катушка, с помощью которой можно создавать магнитное поле. В эксперименте измеряется отклонение нити.

Каждый атом имеет магнитный момент. Намагниченность вещества будет в том случае, если все магнитные моменты атомов сонаправлены. Если все моменты направлены

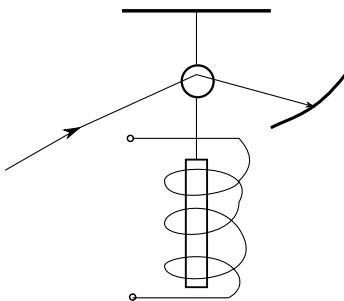


Рис. 9.3: Опыт Эйнштейна - де Хааза

хаотично, то в среднем намагниченность системы будет равна нулю. Если магнитные моменты атомов сонаправлены, то и угловых моменты атомов сонаправлены. Тогда полный магнитный момент стержня  $P$  равен

$$P = \gamma L \quad (9.24)$$

где  $L$  - полный угловой момент стержня.

При появлении внешнего магнитного поля меняется магнитный момент стержня. В силу того, что данную систему можно считать замкнутой, должно выполняться правило сохранения полного углового момента. Значит, должен измениться и угловой момент стержня. Изменение углового момента соответствует повороту.

В результате проведения эксперимента было получено:

$$P_m = -\frac{e}{2mc} 2L \quad (9.25)$$

То есть коэффициент пропорциональности между угловым и магнитным моментом совпадает с коэффициентом, полученного при рассмотрении спинового углового момента. Таким образом, магнитные свойства вещества определяются спином. Более того, эксперимент показывает проявление квантовых свойств вещества на макроскопических масштабах.

## Полный угловой момент

У атома есть два угловых момента -  $\vec{l}$  и  $\vec{s}$ . Значит, должен существовать полный угловой момент

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \quad (9.26)$$

В данном случае речь идёт о квантовых векторах.

Рассмотрим сумму двух квантовых векторов:

$$\vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 \quad (9.27)$$

Для квантового вектора известна его длина, а его проекция может быть квантована. При этом точное расположение вектора неизвестно. Поэтому при сложении квантовых векторов нужно определить длину суммарного вектора и его возможные проекции.

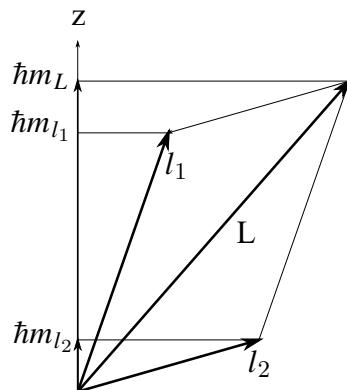


Рис. 9.4: Сложение моментов

Проекцию на ось z можно посчитать следующим образом:

$$\hbar m_L = \hbar(m_{l_1} + m_{l_2}) \quad (9.28)$$

Для квантового числа L нужно перебрать все возможные варианты. Для максимального квантового числа получим:

$$L_{max} = m_{l_{1max}} + m_{l_{2max}} = l_1 + l_2 \quad (9.29)$$

Для минимального:

$$L_{min} = |l_1 - l_2| \quad (9.30)$$

Тогда квантовое число меняется в диапазоне:

$$|l_1 - l_2| \leq L \leq l_1 + l_2 \quad (9.31)$$

Значит, для  $m_L$  будет  $2L + 1$  проекций.

Отметим, что если  $l_1 > l_2$ , то

$$l_1 - l_2 \leq L \leq l_1 + l_2 \quad (9.32)$$

Тогда полное число значений L равно  $2l_2 + 1$ .

Если же  $l_1 < l_2$ , то

$$l_2 - l_1 \leq L \leq l_2 + l_1 \quad (9.33)$$

и число значений будет равно  $2l_1 + 1$ . То есть число значений квантового числа суммарного вектора будет определяться наименьшим из двух слагаемых векторов.

Длина вектора

$$|L| = \sqrt{L(L + 1)} \quad (9.34)$$

Таким образом, длина суммарного вектора может быть различной (так как  $L$  меняется).

Рассмотрим сумму трёх векторов. Тогда нужно сначала сложить первые два вектора и к получившемуся вектору добавить третий вектор по описанной схеме:

$$\vec{L} = (\vec{l}_1 + \vec{l}_2) + \vec{l}_3 \quad (9.35)$$

Однако, если суммировать так:

$$\vec{L} = \vec{l}_1 + (\vec{l}_2 + \vec{l}_3) \quad (9.36)$$

можно получить другой ответ.

Таким образом, полный угловой момент электрона в атоме равен:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \quad (9.37)$$

то есть (так как  $s = 1/2$ )

$$|l - 1/2| \leq j \leq |l + 1/2| \quad (9.38)$$

Например, если  $l = 1$ , то  $j$  изменяется в диапазоне

$$1/2 \leq j \leq 3/2 \quad (9.39)$$

При этом шаг всегда равен единице.

Квадрат полного углового момента:

$$j^2 = \hbar^2 j(j+1) \quad (9.40)$$

Введём проекцию ( $m_j$  - проекция полного углового момента на ось z)

$$j_z = \hbar m_j \quad (9.41)$$

Рассмотрим опыт Штерна-Герлаха в новых терминах. Возьмём квантовые числа  $n, l, s, j$ . Отсюда получим спектр  $m_j$  ( $2j + 1$  значений). Например, для атома водорода в основном состоянии  $j = 1/2$ . Значит число проекций равно 2. Если же  $l \neq 0$ , то нужно из  $l$  и  $s$  посчитать число возможных  $j$ , а для каждого  $j$  посчитать число возможных  $m_j$ .

## Гиромагнитное отношение

Вектору  $l$  соответствует вектор  $\mu_l$ , вектору  $s$  - вектор  $\mu_s$ . Суммируя  $s$  и  $l$ , получаем  $j$ . Полный магнитный момент равен сумме  $\mu_l$  и  $\mu_s$ . Однако, отношения векторов магнитных моментов к соответствующим угловым моментам не равны друг другу (см. (9.22) и (9.23)). Поэтому суммарный магнитный момент не лежит на одной оси с вектором  $j$ .

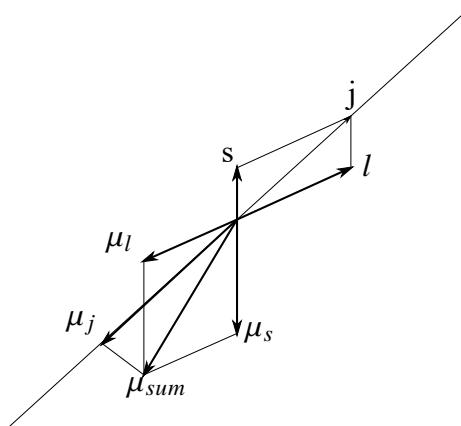


Рис. 9.5: Полный магнитный момент системы

Таким образом, полный магнитный момент системы

$$\mu_j = \mu_B(\vec{l} + 2\vec{s}) \quad (9.42)$$

Ось z в системе появляется естественным образом (ось, вдоль которой направлен угловой момент). Тогда проекция суммарного магнитного момента на ось z:

$$\mu_{j_z} = -\mu_B j \cdot g \quad (9.43)$$

где g - некоторое число, называемая гиромагнитным соотношением (фактор Ланде). Он показывает, насколько магнитный момент отклонился от оси j.

Запишем

$$\mu_j = \mu_B(l + 2s)j \quad (9.44)$$

Запишем проекцию следующим образом:

$$\mu_{j_z} = \mu_B \frac{j}{|j|} = \mu_B \frac{(l + 2s)(l + s)^2}{|j|} \quad (9.45)$$

Тогда получаем:

$$-\mu_{j_z} = \frac{(l + 2s)(l + s)}{j^2} \mu_B j \quad (9.46)$$

Соответственно

$$\mu_{j_z} = -\mu_B j g \quad (9.47)$$

где

$$g = \frac{(l + 2s)(l + s)}{|j|^2} \quad (9.48)$$

Преобразуем полученную формулу:

$$|j|^2 g = (l + 2s)(l + s) = l^2 + 3ls + s^2 \quad (9.49)$$

Усредним

$$\langle |j|^2 \rangle g = (l + 2s)(l + s) = \langle l^2 \rangle + \langle 3ls \rangle + \langle s^2 \rangle \quad (9.50)$$

и учтём, что

$$\langle l^2 \rangle = l(l+1) \quad \langle s^2 \rangle = s(s+1) \quad (9.51)$$

$$\langle j^2 \rangle = \langle (l+s)^2 \rangle = \langle l^2 \rangle + \langle s^2 \rangle + 2\langle ls \rangle \quad (9.52)$$

Выразим  $\langle ls \rangle$ :

$$\langle ls \rangle = \frac{1}{2} \left( j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \right) \quad (9.53)$$

Окончательно получаем

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad (9.54)$$

Таким образом, зная состояние системы  $n, l, s, j$ , можем посчитать фактор Ланде и тем самым для каждого  $j$  посчитать величину проекции магнитного момента на ось  $j$ :  $\mu_{jz} = -\mu_B \cdot g j$ . При этом  $g$  может быть положительным, отрицательным и нулевым (магнитный момент перпендикулярен угловому моменту).

Для основного состояния атома водорода  $n = 1, l = 0, s = 1/2, j = 1/2$ , поэтому фактор Ланде равен 2.

Для описания состояния электрона в атоме используют следующие обозначения. Каждому  $l$  ставят в соответствие некоторую латинскую букву. Состояние можно записать так:  $2p_{3/2} \rightarrow n = 2 \ l = 2 \ j = 3/2$

## Принцип Паули

Принцип Паули гласит, что в одной квантовой системе два электрона не могут находиться в состоянии с одинаковыми волновыми функциями. Это означает, что у двух электронов не могут полностью совпадать наборы квантовых чисел  $n, l, j, s, m_l, m_s$ . Например, для атома гелия в основном состоянии  $n = 1, l = 0, j = 1/2, s = \pm 1/2$ . Поэтому электроны в атоме гелия должны находиться в состояниях с противоположно направленными спинами.

## Лекция 10. Молекулы.

### Принцип Паули

Рассмотрим систему из двух частиц. Введём оператор перестановки частиц местами в квантовой системе. Если система находилась в состоянии  $\psi(\xi_1, \xi_2)$  (где  $\xi_1$  - переменная, описывающая одну частицу,  $\xi_2$  - переменная, описывая другую (идентичную частицу)), то по определению оператор перестановки меняет частицы местами:

$$\hat{P}\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_2, \xi_1) \quad (10.1)$$

При этом частицы являются неразличимыми. То есть

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \lambda\psi(\xi_2, \xi_1) \quad (10.2)$$

Используем оператор двойной перестановки:

$$\hat{P}^2\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_1, \xi_2) \quad (10.3)$$

Распишем это уравнения, пользуясь определением:

$$\hat{P}\left(\hat{P}\psi(\xi_1, \xi_2)\right) = \hat{P}\left(\lambda\hat{P}\psi(\xi_2, \xi_1)\right) = \lambda^2\psi(\xi_1, \xi_2) \quad (10.4)$$

Значит,

$$\lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1 \quad (10.5)$$

Таким образом, есть два сорта квантовых объектов. Для одних при перемене частиц местами волновая функция переходит сама в себя ( $\lambda = 1$ ). Для других - волновая функция меняет знак ( $\lambda = -1$ ). При этом плотность вероятности в обоих случаях не изменяется. Для частиц с  $\lambda = 1$  волновая функция является симметричной, с  $\lambda = -1$  - асимметричной.

Предположим, что частицы независимы. Тогда волновая функция двух невзаимодействующих частиц (так как вероятности независимых случайных событий перемножаются)

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi_I(\xi_1) \cdot \psi_{II}(\xi_2) \quad (10.6)$$

где  $\psi_I, \psi_{II}$  - волновые функции частиц.

Однако, если переставить частицы местами, получим

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi_I(\xi_2) \cdot \psi_{II}(\xi_1) \quad (10.7)$$

и если  $\psi_I$  и  $\psi_{II}$  не совпадают, то принцип тождественности частиц не будет выполнен (так как в обоих случаях можно будет пометить каждую частицу - их можно будет различить).

Составим волновую функцию следующим образом ( $\frac{1}{\sqrt{2}}$  следует из нормировки)

$$\psi_S(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_I(\xi_1) \cdot \psi_{II}(\xi_2) + \psi_I(\xi_2) \cdot \psi_{II}(\xi_1)) \quad (10.8)$$

Эта функция удовлетворяет идею о перемножении вероятностей и принципу тождественности частиц (нельзя сказать, какая частица в каком состоянии). Однако, точно такими же свойствами будет обладать и такая функция:

$$\psi_A(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_I(\xi_1) \cdot \psi_{II}(\xi_2) - \psi_I(\xi_2) \cdot \psi_{II}(\xi_1)) \quad (10.9)$$

Таким образом, две частицы можно сгруппировать двумя способами. Заметим, что функцию  $\psi_S(\xi_1, \xi_2)$  оператор перестановки переводит саму в себя, а  $\psi_A(\xi_1, \xi_2)$  меняет знак ( $\psi_S(\xi_1, \xi_2)$  - симметричная волновая функция,  $\psi_A(\xi_1, \xi_2)$  - асимметричная).

Рассмотрим случай одинаковых волновых функций частиц:

$$\psi_I = \psi_{II} \quad (10.10)$$

Тогда получим, что  $\psi_S = 2\psi_I$ , а  $\psi_A = 0$ . Это означает, что для частиц, описываемых антисимметричной волновой функцией, ситуация  $[\psi_I = \psi_{II}]$  запрещена, так как частицы есть, а вероятность равна нулю. Значит, для антисимметричных частиц должно выполняться  $\psi_I \neq \psi_{II}$ . Это и есть принцип Паули (два электрона не могут находиться в одной системе в одном и том же квантовом состоянии). Это означает, что электроны всегда описываются антисимметричной волновой функцией.

Сущность квантовых частиц жестко связана со спином. Оказывается, что для частиц с полуцелым спином волновая функция всегда асимметрична и выполняется принцип Паули. Для частиц с целым спином волновая функция симметрична и принцип Паули не выполняется (частицы могут находиться в одном квантовом состоянии).

Принцип Паули работает для любых частиц с полуцелым спином.

Примеры частиц с полуцелым спином:  $e$ ,  $p$ ,  $n$ .

Частицы с целым спином и симметричной волновой функцией  $\psi_S$  называют бозонами.

Частицы с полуцелым спином и асимметричной волновой функцией  $\psi_A$  - фермионами.

Рассмотрим ядро атома дейтерия -  $p + n$ . Суммарный спин системы равен  $s = 0, 1$ . Значит, ядро атома дейтерия является бозоном. Аналогично ядро атома гелия является бозоном. Если в ядре нечётное число протонов и нейтронов, то такое ядро останется фермионом. Таким образом, спин определяет свойства симметрии и антисимметрии системы.

Фотон тоже является бозоном. Формально спин фотона равен 1. Такой спин должен иметь три проекции углового момента:  $0, \pm 1$ . С точки зрения электромагнитных волн спин

соответствует поляризации излучения ( $\pm 1$ ). При этом нулевой проекции в природе нет, так как в противном случае нулевая проекция соответствовала бы продольным электромагнитным волнам, что противоречит уравнениям Максвелла.

Ещё один пример бозона - фонон. Описать фонон можно следующим образом. Пусть имеется кристаллическая решётка (регулярно расположенные атомы, связанные упругими силами). Если возмутить один атом, то возмущение будет передаваться другим атомам. В такой системе могут возникать колебания. Описание таких колебаний можно свести к описанию акустических волн. При этом любой гармонический осциллятор можно проквантовать. Тогда от описания волн в кристаллах можно перейти к описанию частиц, называемых фононами. То есть фонон - квант колебаний акустического поля кристалла (точно так же, как фотон – квант колебаний электромагнитного поля).

Спин фонона равен 1, у спина также три проекции - 0,  $\pm 1$ . Однако в этом случае нулевая проекция спина не запрещена (в твёрдом теле возможны как поперечные, так и продольные звуковые волны).

Отметим, что волновые функции  $\psi_I$  и  $\psi_{II}$  перекрываются во времени и пространстве. Если частицы не будут принадлежать одной квантовой системе (например, они будут находиться в разных углах комнаты), частицы становятся различимыми и описанный выше подход неуместен.

## Периодическая система элементов

Уравнение Шредингера для электрона в центрально поле может быть точно решено только для атома водорода (при использовании упрощений). В случае добавления хотя бы одного электрона задача уже становится неразрешимой аналитически (задача трёх тел).

Выше было указано, что полное число возможных состояний с различающимися квантовыми числами равно  $2n^2$ . В частности,  $n = 1 \Rightarrow 2$  (состояния, где все квантовые числа, кроме проекций спина одинаковы). При  $n = 2$  получаем 8 состояний. Из них два состояния с нулевым угловым моментом и шесть состояний с  $l = 1$ . Для  $n = 3$  получаем восемнадцать состояний. Из них два состояния с  $l = 0$  и шесть состояний с  $l = 1$  и десять состояний с  $l = 2$ . Для  $n = 4$  32 состояния.

Каждый период таблицы Менделеева заканчивается элементом, у которого все возможные состояния электронов заняты (благородные газы).

В основном состояния заполняются последовательно (так как пока что считаем, что энергия состояния не зависит от углового момента). Сначала заполняются состояния с наименьшим  $l$ . Первый период таблицы Менделеева состоит из водорода и гелия. Во втором периоде находятся атомы, у которых заполнено состояние и постепенно заполняется второе (заканчивается неоном).

При расчёте угловых или спиновых моментов атомов следует учитывать, что если любая оболочка полностью заполняется, то она заполняется таким образом, что её полный угловой момент равен нулю. Так, для атома криптона полный угловой момент всегда равен нулю.

Отметим, что расположение атомов в таблице Менделеева не всегда соответствует правилу, описанному выше. В многоэлектронных атомах возникает эффект кулоновской экранировки (в случае 2s и 2p состояний часть волновой функции 2s экранируется остальными электронами и основной вклад будет давать другая часть функции (та, что ближе к ядру)). В результате возникает перекрытие уровней (например, уровень 4s имеет большую энергию взаимодействия, чем 3d. Поэтому уровень 4s будет заполнен раньше, чем 3d.). Данный эффект наблюдается, например, для переходных металлов, в том числе для железа.

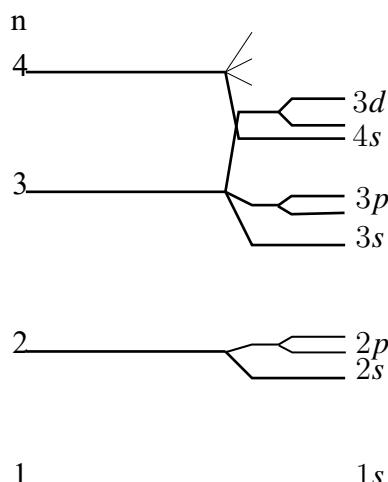


Рис. 10.1: Заполнение уровней

Подобные эффекты приводят к существованию двух видов гелия. Гелий - система из двух электронов. Для гелия в основном состоянии (парагелий) оба электрона находятся на уровне 1s, причём их спины антипараллельны. Если возбудить такую систему, то один из электронов перейдёт на уровень 2s. Тогда электрон на втором уровне может иметь как сонаправленный, так и противонаправленный спин (по отношению к электрону на уровне 1s). При этом оказывается, что переход электрона из состояния 2s в 1s (при условии, что его спин сонаправлен со спином на нижней оболочке) требует смены ориентации спина. Однако, такой процесс не может протекать произвольно (переход запрещён). Атом с такой конфигурацией называется ортогелием.

## Молекулы

Рассмотрим следующие молекулы:  $H_2$ ,  $NaCl$ ,  $Kr_2$ . В случае  $NaCl$  атом натрия имеет один валентный электрон (так как это щелочной металл) и полностью заполненную атомную оболочку. Взаимодействие данного электрона с ядром ослаблено, так как между ним и ядром расположена полностью заполненная электронная оболочка. В атоме хлора не хватает одного электрона до состояния полностью заполненной оболочки. Поэтому между атомами возникает гетерополярная связь. Электрон натрия оттягивается хлором, вследствие чего атом натрия притягивается к хлору.

В случае атома  $H_2$  возникает гомополярная связь (оба атома равноправны).

В случае  $Kr_2$  возникает ван-дер-ваальсова связь. У атома криптона оболочки полностью заполнены, поэтому взаимодействие маловероятно. Однако, при сближении двух атомов произойдёт поляризация, вследствие чего возникнет притяжение. Для образования данной связи нужны низкие температуры, так как любые тепловые эффекты разрушают связь. Энергия этой связи очень мала.

## Гетерополярная связь

Рассмотрим гетерополярную связь. Имеем две потенциальные ямы, соответствующие атому натрия (яма с электроном) и атому хлора (пустая яма). Ямы начинают сближаться.

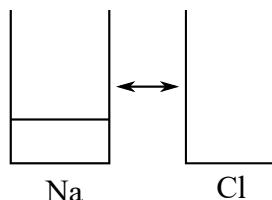


Рис. 10.2: Иллюстрация к примеру образования гетерополярной связи

В результате получим систему, состоящую из ямы шириной  $a$ , барьера шириной  $b$  и ещё одной ямы шириной  $a$  (см. Рис. 10.3).

Рассмотрим, какие возможны состояния электрона в такой яме. Разделим пространство на три области (см. Рис. 10.3). Будем считать, что энергия электрона  $E < U_0$ .

Введём:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (10.11)$$

$$\chi^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \quad (10.12)$$

Тогда решение в первой области будет иметь вид:

$$\psi_1 = A_1 \sin kx \quad (10.13)$$

(здесь было учтено, что в нуле волновая функция обращается в ноль, вследствие чего фаза равна нулю).

В третьей области (учтём, что в точке  $2a + b$  функция должна обращаться в ноль).

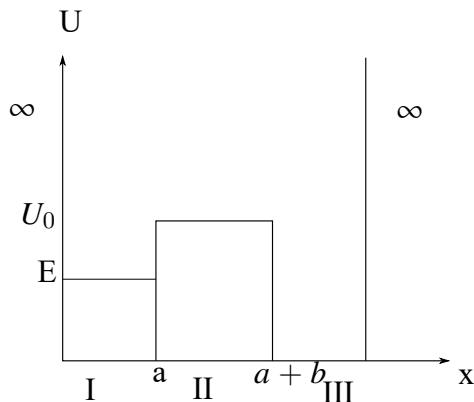


Рис. 10.3: Модель ямы при образовании гетерополярной связи

$$\psi_{\text{III}} = A_3 \sin(k(2a + b - x)) \quad (10.14)$$

для второй области формально запишем:

$$\psi_{\text{II}} = C_2 e^{-\kappa b} + D_2 e^{\kappa b} \quad (10.15)$$

Рассмотрим граничные условия в точках  $a$  и  $a + b$  (непрерывность и гладкость функции):

$$\psi_{\text{I}}(a) = \psi_{\text{II}}(a) \quad (10.16)$$

$$\psi'_{\text{I}}(a) = \psi'_{\text{II}}(a) \quad (10.17)$$

$$\psi_{\text{II}}(a + b) = \psi_{\text{III}}(a + b) \quad (10.18)$$

$$\psi'_{\text{II}}(a + b) = \psi'_{\text{III}}(a + b) \quad (10.19)$$

Из полученной системы четырёх уравнений можно исключить коэффициенты  $C_2$  и  $D_2$  и получить уравнения, в которых будут только коэффициенты  $A_1$  и  $A_3$  (решение во второй области нас не интересует). Полученные уравнения имеют вид:

$$(\kappa \operatorname{ctg} \alpha + k) A_1 e^{kb} = -(-\kappa \operatorname{ctg} \alpha - k) A_3 \quad (10.20)$$

$$(-\kappa \operatorname{ctg} \alpha - k) A_1 e^{-kb} = (\kappa \operatorname{ctg} \alpha + k) A_3 \quad (10.21)$$

Получили систему из двух уравнений (10.20) и (10.21) относительно  $A_1$  и  $A_3$ . Чтобы данная система имела нетривиальное решение, необходимо, чтобы её детерминант был равен

нулю. Отсюда можно получить

$$\chi \operatorname{ctg} \alpha + k = \pm e^{-kb} (\chi \operatorname{ctg} \alpha - k) \quad (10.22)$$

$b$  - расстояние между двумя ямами. Рассмотрим случай  $b \rightarrow \infty$  (устремляя расстояние между ямами, получаем яму конечной глубины). Тогда  $e^{-kb} \rightarrow 0$  и тем самым получаем уравнение для ямы конечно глубины.

В случае  $b \neq 0$  имеем два решения (так как в правой части уравнения стоит  $\pm$ ). Это означает, что существует два значения энергии, которые может иметь электрон (так как  $k$  и  $\chi$  есть функции энергии). При этом невозмущённая энергия получается, когда  $b \rightarrow \infty$  (одна яма). Тогда правую часть уравнения (10.22) можно рассматривать как поправку. Тогда данное уравнение можно решить методом последовательных приближений. При этом получится две ветви решения, то есть при сближении двух ям уровень расщепляется.

Пусть решение уравнения (10.22) получено (получим энергию, при которой выполняется уравнение). Тогда можно решить систему (10.20)-(10.21) и получить коэффициенты  $A_1$  и  $A_3$ . Тогда можно получить (решения, соответствующие определённому знаку в (10.22) обозначаются верхним индексом + или -), что

$$A_3^- = A_1^- \quad (10.23)$$

$$A_3^+ = -A_1^+ \quad (10.24)$$

Таким образом, в случае знака минус в (10.20) получаем симметричное решение (если решение в левой яме выглядит определённым образом, то решение в правой яме будет симметрично относительно середины барьера (см. пример на Рис. 10.4)).

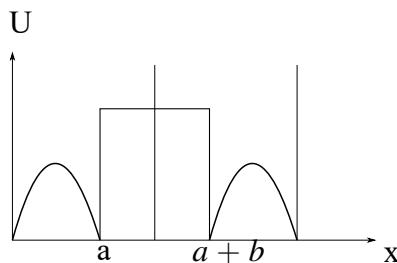


Рис. 10.4: Пример симметричного решения

В случае же знака минус в (10.20) решение будет антисимметрично (см. пример на Рис. 10.5)).

Более того, поправки к энергии будут таковы, что один уровень сдвинется вверх от исходного состояния, а другой - вниз. При этом для симметричной функции (10.23) зависимость энергии уровня от расстояния между ямами будет таковой, что при сближении двух систем абсолютное значение энергии увеличивается. Для антисимметричного решения

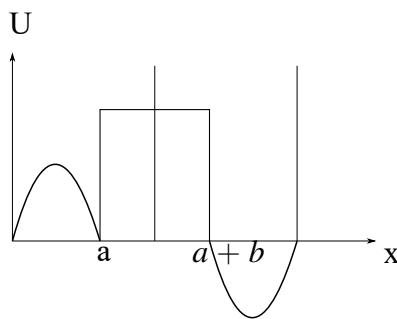


Рис. 10.5: Пример антисимметричного решения

(10.24) в зависимости возникнет небольшая яма (локальный минимум). Причём расстояние, на котором возникнет этот минимум, будет равно размеру молекулы. Если глубина этой ямы больше энергии столкновения с другими молекулами, то система, попав в такое состояние, в нём и остаётся. Таким образом, указанная яма соответствует связанному состоянию (то есть образованию молекулы).

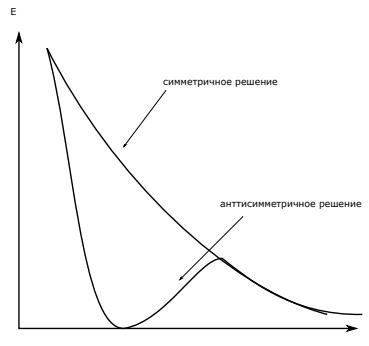


Рис. 10.6: Зависимость уровня энергии от расстояния между ямами

## Гомополярная связь

Рассмотрим образование гомополярной связи для молекулы водорода. Запишем потенциал

$$U = U_a + U_b + U_{ab}^{(ec)} + U_{ab}^{(ea)} + U_{ba}^{(ea)} \quad (10.25)$$

где  $U_i$ ,  $i = a, b$  - кулоновская энергия для одного атома водорода,  $U_{ab}^{(ee)}$  - потенциальная (кулоновская) энергия взаимодействия электронов между собой,  $U_{ab}^{(ea)}$  - потенциальная энергия взаимодействия электрона атома  $a$  с протоном атома  $b$ ,  $U_{ba}^{(ea)}$  - энергия взаимодействия электрона атома  $b$  с протоном атома  $a$ .

Для уравнения Шрёдингера с таким потенциалом нет точного решения. Когда две квантовые системы (два электрона) начинают сближаться, между ними начинается взаимодействие и принцип Паули работает для двух атомов в целом. В частности это означает, что

электроны не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии молекулы. Спины электронов могут быть сонаправлены или противоположно направлены, что будет соответствовать двум разным энергиям взаимодействия атомов. Если посчитать энергию взаимодействия, получим, что в случае противоположно направленных спинов система будет обладать локальным минимумом, который будет соответствовать образованию молекулы водорода. В случае сонаправленных спинов существует только разлетное состояние молекулы (минимума нет, атомам энергетически выгодно разлететься на бесконечное расстояние).

Можно показать, что энергию уровня можно представить в виде

$$E = E_0 + \Delta E^\pm + \Delta E^0 \quad (10.26)$$

где  $E_0$  - энергия, которая присутствовала исходно в атоме,  $\Delta E^\pm$  - поправка, связанная с симметричным и антисимметричным взаимодействием  $\Delta E^0$  - поправка, связанная с обменным взаимодействием.

В поправку, связанную с обменным взаимодействием входит интеграл от совместной плотности вероятности двух электронов. Если электроны не взаимодействуют, то их волновые функции не пересекаются в пространстве и интеграл, указанный выше, равен нулю. Если же волновые функции пересекаются, то интеграл отличен от нуля. Таким образом, возникает некоторое квантово-механическое взаимодействие систем.

## Энергетическая структура молекул

Пусть существует некоторая молекула из двух атомов. Значит, потенциал взаимодействия имеет локальный минимум:

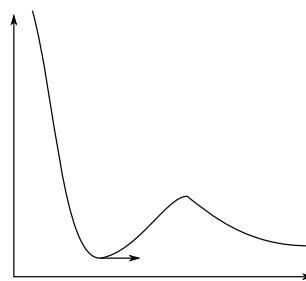


Рис. 10.7: Потенциал взаимодействия

При увеличении расстояния между атомами возникнет возвращающая сила, равная градиенту потенциала.

Часть ямы вблизи дна можно аппроксимировать параболой  $U = \frac{kx^2}{2}$ . Тогда уравнение Шрёдингера в точке минимума потенциала станет колебательным уравнением (так как возвращающая сила есть сила Гука  $F = -kx$ ).

Таким образом, молекулу можно рассматривать как два атома, соединённых пружинкой. В квантовой физике уравнение вида (10.27), дающее гармонические решения, называется уравнением квантового гармонического осциллятора.

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \quad (10.27)$$

Это уравнение имеет точное решение (в специальных функциях). При этом спектр собственных значений оператора Гамильтона имеет вид

$$E_n = \hbar\sqrt{\frac{k}{m}}(n + 1/2) \quad n \geq 0 \quad (10.28)$$

Всё, описанное выше можно переопределить для молекул из большого числа атомов. Рассмотрим другую связь между атомами. Если представить, что атомы в молекуле связаны жёстким стержнем, а не пружинкой, то для рассматриваемой двухатомной системы появятся две степени свободы (вращательные) - появляются две оси, вокруг которых может происходить вращение. Для таких вращений можно записать оператор квадрата момента импульса (где  $j$  - новое квантовое число):

$$M^2 = \hbar^2 j(j + 1) \quad (10.29)$$

Заметим, что электронная энергия пропорциональна корню из  $m_e$ :

$$E_e \propto (\sqrt{m_e})^{-1} \quad (10.30)$$

Энергия колебаний

$$E_{osc} \propto (\sqrt{m_p})^{-1} \quad (10.31)$$

Вращательная энергия:

$$E_e \propto m_e^{-1} \quad (10.32)$$

Тогда можно получить соотношение между энергиями. Энергия (10.32) меньше (10.31) примерно в  $\sqrt{\frac{m_p}{m_e}}$  раз. Вращательная энергия ещё меньше. Это приводит к тому, что для двухатомной молекулы спектр состояний электрона имеет следующий вид. Есть система атомных уровней. Для каждого атомного уровня есть система колебательных уровней (они эквидистантны). Каждый колебательный уровень имеет свою вращательную структуру.

## Лекция 11. Бозоны и фермионы.

### Молекулы

Рассмотрение новых степеней свободы (в сравнении с атомом) позволяет упростить решение задачи. В новой системе (в случае двухатомной молекулы) сохраняются три поступательные степени свободы и основная структура электронов в атоме, появляются две степени свободы, связанные с вращением и одна степень свободы, связанная с колебаниями. Новые степени свободы можно рассматривать как ротор и осциллятор соответственно. В предыдущей лекции были указаны формулы для квантовых ротора и осциллятора. При этом колебательный спектр является эквидистантным, вращательный спектр эквидистантным не является, однако любое его расстояние между уровнями меньше, чем для колебательного спектра. Таким образом, структуру уровней можно представить следующим образом: некоторый электронный уровень, который характеризует состояние электрона в атоме имеет структуру эквидистантно расположенных колебательных уровней, каждый из колебательных уровней имеет вращательную структуру:

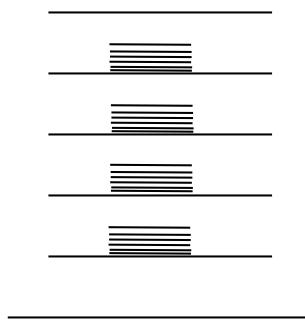


Рис. 11.1: Структура уровней двухатомной молекулы

Выясним, чему равна теплоёмкость двухатомного газа. Согласно классической молекулярной физике, чтобы посчитать теплоёмкость, нужно посчитать число степеней свободы. Тогда (по теореме о равнораспределении энергии по степеням свободы) получаем, что у двухатомной молекулы есть 6 степеней свободы, соответственно, теплоёмкость будет  $\frac{6k}{2} = 3k$ .

Однако, экспериментально было доказано, что теплоёмкость водорода при комнатной температуре равна  $\frac{5}{2}k$ , а при низких температурах -  $\frac{3}{2}k$ .

Рассмотрим случай комнатной температуры:  $T \approx 300K$ , что в электронвольтах  $\sim 0.03$  эВ. Данная величина много меньше расстояния между колебательными уровнями. Соответственно, если система находится в некотором состоянии, то температура слишком мала, чтобы возбудилось следующее колебательное состояние. С точки зрения квантовой физики данный эффект называется **вымораживанием степени свободы**. При этом вращательные степени свободы остаются. Однако при понижении температуры, то величина температуры в эВ много меньше вращательного расщепления уровней (вымораживаются

ещё две степени свободы).

## Ансамбль квантовых частиц

Рассмотрим ансамбль квантовых частиц - большое число квантовых частиц, которые между собой не взаимодействуют (с точки зрения классической физики), но при этом находятся достаточно близко, чтобы между ними возникли квантовые корреляции. Это означает, что характерный размер волновой функции частиц должен быть сравним с расстоянием между частицами (интеграл перекрытия не равен нулю).

Для описания ансамблей используются различные распределения.

Для кинетической энергии существует распределение Максвелла. Тогда число частиц на единичный интервал по импульсу:

$$dN_m = A e^{-\frac{E}{kT}} d\vec{p} \quad (11.1)$$

Больцмановское распределение для потенциальной энергии:

$$dN_B = A e^{\frac{E}{kT}} d\vec{r} \quad (11.2)$$

Максвелловское распределение - наиболее вероятное распределение. Одним из ключевых предположений, позволяющих получить распределение, является различимость частиц. В квантовой физике данное предположение использовать нельзя. Вывод квантовых распределений отличается от классических и зависит от того, какие квантовые частицы рассматриваются. Рассмотрим вывод распределения для безмассовых бозонов (фотоны). Посчитаем, сколько состояний приходится на единичный интервал импульсов или энергий. Для этого рассмотрим ящик с зеркальными стенками (с размерами A, B и C):

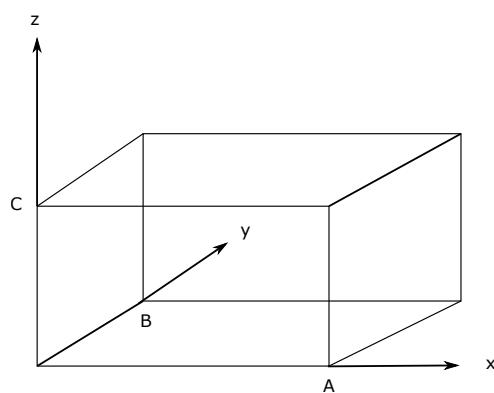


Рис. 11.2: Иллюстрация к расчёту

Волновой функций фотона является стоячая электромагнитная волна с узлами на всех

поверхностях:

$$\psi(x, y, z) = \sum A_{nml} \sin(k_{xn}x) \sin(k_{ym}y) \sin(k_{zl}z) \quad (11.3)$$

При этом

$$\omega c = k_{nml} = \sqrt{k_{xn}^2 + k_{ym}^2 + k_{zl}^2} \quad (11.4)$$

На левой плоскости ящика (плоскость Oyz) узлы образуются автоматически. Чтобы узел образовался и на правой плоскости, необходимо выполнение условия:

$$k_{xn}A = \pi n \quad (11.5)$$

Отсюда получаем условия формирования стоячей волны:

$$k_{xn} = \frac{\pi}{A}n \quad k_{ym} = \frac{\pi}{B}m \quad k_{zl} = \frac{\pi}{C}l \quad (11.6)$$

Энергия фотона равна

$$E = pc = \hbar kc \quad (11.7)$$

Из формул (11.4), (11.6) и (11.7) можно получить формулу для энергии.

Таким образом, мы перешли в пространство волновых векторов. Рассмотрим полное число собственных состояний для энергий  $E < E_0$ .  $E_0$  соответствует  $k$ , поэтому в пространстве волновых векторов  $E_0$  соответствует сфере:

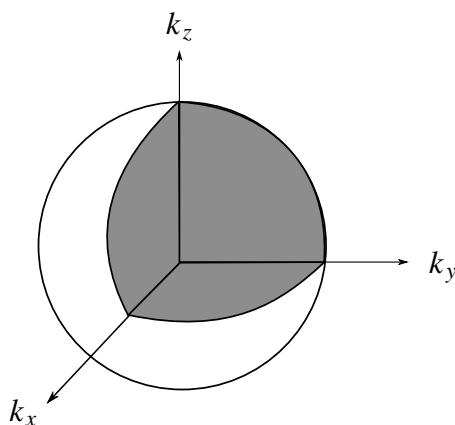


Рис. 11.3: Сфера в пространстве волновых векторов

Рассмотрим одну восьмую сферы (см. Рис. 11.4).

Число узлов (см. Рис. 11.4) будет равно числу состояний фотона с энергией  $E < E_0$ . Тогда число состояний равно отношению объёма одной восьмой сферы к объёму, занима-

емому одним состоянием. Так как сетка прямоугольная, объём одного состояния равен:

$$V^{(1)} = \frac{\pi}{A} \cdot \frac{\pi}{B} \cdot \frac{\pi}{C} = \frac{\pi^3}{V} \quad (11.8)$$

где  $V$  - полный объём зеркального ящика.

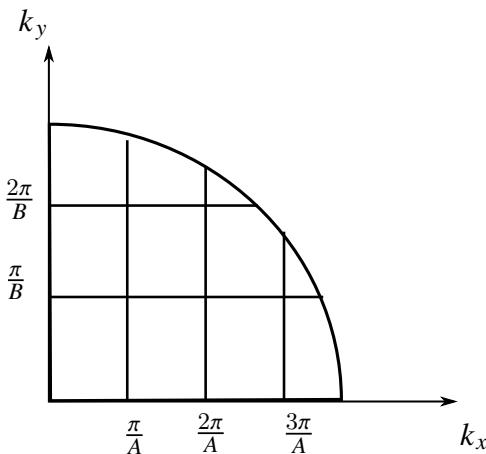


Рис. 11.4: Иллюстрация к расчёту

Таким образом, число состояний фотона с энергией  $E < E_0$

$$N(E_0) = \frac{V_{1/8}}{\pi^3/V} = \frac{\frac{1}{8}\frac{4}{3}\pi\hbar^3k_0^3}{\pi^3}V = \frac{1}{6\pi^2}\hbar^3k_0^3V \quad (11.9)$$

Введём величину, являющуюся объёмом в полном (6-мерном) пространстве. Она равна произведению в координатном пространстве на объём в пространстве импульсов:

$$\Gamma_0 = V \cdot \frac{4}{3}\pi\hbar^3k_0^3 \quad (11.10)$$

Тогда получим

$$N(E_0) = \frac{\Gamma_0}{(2\pi\hbar)^3} \quad (11.11)$$

Таким образом, число состояний с энергией  $E < E_0$  равно фазовому объёму системы в шестимерном пространстве, разделённому на объём (в :-мерном пространстве) одного состояния  $((2\pi\hbar)^3)$ .

Нужно учесть, что каждое состояние может быть вырожденным. Тогда, в случае фотонов к полученной формуле нужно добавить множитель 2 (две проекции спина). Для некоторой системы вообще говоря:

$$N(E_0) = \frac{\Gamma_0}{(2\pi\hbar)^3}(2J+1) \quad (11.12)$$

Посчитаем число состояний на единичный интервал энергии. Для данной энергии число

состояний на единичный интервал энергии есть функция:

$$g(E)dE = \left( N(E + dE) - N(E) \right) = \frac{dN(E)}{dE}dE \quad (11.13)$$

Преобразуем:

$$\frac{dN}{dE}dE = \frac{dp}{dE} \frac{dN}{dp}dE = (2J + 1) \frac{4\pi p^2 V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dp}{dE}dE \quad (11.14)$$

Заметим, что  $4\pi p^2 V dp$  есть площадь шарового слоя (толщиной  $dp$ ) в 6-мерном пространстве.

Таким образом,

$$g(E)dE = (2J + 1) \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\Gamma}{dE}dE \quad (11.15)$$

Величина  $g(E)$  называется статистическим весом состояния.

Данную величину можно посчитать как для фотона, так и для любой нерелятивистской частицы массы  $m$ , для которой  $p = \sqrt{2mE}$  (подставив в  $\frac{dp}{dE}$ ).

Данная формула (11.15) справедлива для любой системы квантовых частиц, хотя выводилась для фотона.

## Распределения частиц по состояниям

Посчитаем, сколько частиц приходится на каждое состояние. Тогда получим распределение частиц по энергиям (квантовый аналог распределения Максвелла).

Пусть есть  $n_i$  частиц и  $g_i$  возможных состояний. Найдём максимально вероятное распределение этих частиц по данным состояниям, учитывая, что частицы неразличимы.

$n_i$  частиц можно распределить по  $g_i$  состояниям  $C_{g_i}^{n_i}$  способами. Все состояния независимы, поэтому полная вероятность равна произведению:

$$p = \prod C_{g_i}^{n_i} \quad (11.16)$$

Наиболее вероятное распределение соответствует максимальному значению  $p$ .

Дальнейшее рассмотрение зависит от типа частиц. Рассмотрим фотоны. Фотон - безмассовая частица, поэтому нужно наложить дополнительное условие: сумма энергий всех частиц есть некоторая константа:

$$\sum n_i \varepsilon_i = const \quad (11.17)$$

где  $\varepsilon_i$  - энергия фотонов в  $i$ -м состоянии.

Таким образом, нужно взять производную от (11.16) от вероятности и, учитывая (11.17),

получить:

$$n_i = g_i \frac{1}{e^{E_i/\theta} - 1} \quad (11.18)$$

где  $\theta$  - некоторая константа.

Рассмотрим переход к классической теории - случай больших энергий. Тогда экспонента  $e^{E_i/\theta}$  много больше единицы и можно получить стандартное распределение:

$$\frac{n_i}{g_i} = e^{-E_i/\theta} \quad (11.19)$$

При переходе к классическому случаю формула должна стать классической. Это возможно, если  $\theta = kT$ .

Таким образом, распределение для фотонов имеет вид:

$$n(E) = g(E) \frac{1}{e^{E/kT} - 1} \quad (11.20)$$

Из полученной формулы можно получить объёмную спектральную плотность мощности излучения абсолютно чёрного тела (формулу Планка):

$$u_\omega V d\omega = n(E) E dE = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad (11.21)$$

Если (11.21) проинтегрировать, то можно получить закон Стефана-Больцмана.

Рассмотрим бозоны в общем случае. Для всех бозонов (кроме фотона)  $m \neq 0$ , поэтому помимо условия (11.17) (сохранение энергии) можно наложить условие сохранения числа частиц.

С учётом данного условия можно получить (без доказательства):

$$\frac{n(E)}{g(E)} = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1} \quad (11.22)$$

где  $\mu$  - химический потенциал.

Определим химический потенциал. Полное число частиц фиксировано, поэтому полный интеграл от полученного распределение (11.22) по всем энергиям есть полное число частиц. При взятии интеграла по энергии от (11.22) получим уравнение, в котором единственный параметр -  $\mu$ . То есть химический потенциал полностью определяется полным числом частиц в системе. В случае фотонов  $\mu = 0$ .

Рассмотрим фермионы. Фермионы - частицы с полуцелым спином; для фермионов выполняется принцип Паули. Таким образом, к условиям неизменности числа частиц и энергии добавляется условие того, что в каждом состоянии может находиться не более

одной частицы. Учёт нового условия изменяет формулу:

$$\frac{n(E)}{g(E)} = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} \quad (11.23)$$

Заметим, что для бозонов  $e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1 > 0$  (так как число частиц не может быть отрицательным), то есть  $e^{\frac{E-\mu}{kT}} > 1$ . Таким образом, для бозонов  $\mu < 0$ .

Аналогично можно показать, что химический потенциал для фермионов  $\mu > 0$ .

Распределение числа частиц по энергии для бозонов (11.22) называется **распределением Бозе-Эйнштейна**.

Распределение для фермионов (11.23) называется **распределением Ферми-Дирака**.

Для фермионов  $\mu$  называют **энергией Ферми** и обозначают  $\varepsilon_F$ .

Рассмотрим переход к классической теории. Тогда, считая, что энергии большие, в обеих формулах (11.22) и (11.23) можно пренебречь единицей. Значит, оба распределения стремятся к одному и тому же распределению вида

$$A e^{-\frac{(E-\mu)}{kT}} = A e^{\frac{\mu}{kT}} e^{-\frac{E}{kT}} \quad (11.24)$$

Данное распределение является распределением Максвелла с константой вида  $A e^{\frac{\mu}{kT}}$ . Чтобы определить данную константу, необходимо взять интеграл по всем энергиям и приравнять его числу частиц в системе.

## Распределение Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна

Рассмотрим распределение Ферми-Дирака:

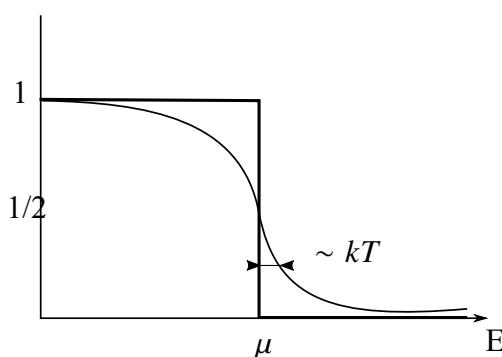


Рис. 11.5: Распределение Ферми-Дирака

Вероятность попадания частицы в состояние с  $E = \mu$  равна  $1/2$ .

Можно показать, что величина перехода (см. Рис. 11.5) равна  $kT$ . В частности, при  $T = 0$

распределение вырождается в ступеньку. Это означает, что все состояния с энергией  $E < \mu$  заняты, а все состояния с энергией  $E > \mu$  пустые.

В случае распределения Бозе-Эйнштейна химический потенциал отрицателен, а отрицательные энергии отсутствуют, поэтому распределение выглядит следующим образом:

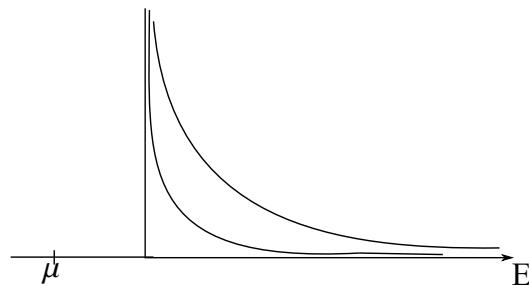


Рис. 11.6: Распределение Бозе-Эйнштейна

При уменьшении температуры распределение приближается к нулевой энергии.

## Конденсат Бозе — Эйнштейна

Для бозонов полное число частиц равно

$$N = \sum g_i \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1} \quad (11.25)$$

Исследуем поведение полного числа частиц при температуре, стремящейся к нулю. Перейдём от суммы к интегралам по энергиям. Тогда получим:

$$N = (2J+1) \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} V \int_0^\infty \frac{\sqrt{E} dE}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1} \quad (11.26)$$

Учтём, что  $\mu < 0$ . Тогда интеграл в формуле (11.26) можно оценить сверху:

$$I = \int_0^\infty \frac{\sqrt{E} dE}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1} \leq \int_0^\infty \frac{\sqrt{E} dE}{e^{\frac{E}{kT}} - 1} \quad (11.27)$$

Введём параметр  $x = \frac{E}{kT}$ . Тогда (11.27) можно переписать в виде:

$$I \leq (kT)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1} \quad (11.28)$$

Известно, что интеграл  $\int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x}dx}{e^x - 1} \approx 2.3$ .

Таким образом, интеграл I стремится к нулю при стремлении к нулю температуры. Отсюда получаем, что полное число частиц системы стремится к нулю при  $T \rightarrow 0$  (так как интеграл I входит в формулу (11.26)). Однако это противоречит введённому ранее условию.

Эйнштейн объяснил данное явление как формирование нового квантового состояния – состояния, в котором энергия частицы  $E \approx 0$  и много меньше, чем энергия отдельной частицы в ансамбле. Таким образом, квантовое взаимодействие между отдельными частицами ансамбля при  $T \rightarrow 0$  становится настолько сильным, что уже нельзя говорить об отдельных элементах данного ансамбля. Все частицы собираются в области энергии вблизи нуля и образуют единую квантовую систему (Бозе-Эйнштейновский конденсат). При этом наблюдается высокая локализация системы в пространстве.

Бозе — Эйнштейновский конденсат следует рассматривать как одну частицу (в данном случае одна волновая функция описывает все частицы).

## Эффекты сверхпроводимости и сверхтекучести

Рассмотрим атом гелия в основном состоянии. Два электрона в атоме гелия будут иметь спины  $s = 1/2$  и  $s = -1/2$ . То есть полный спин равен нулю. Таким образом, система из двух электронов является бозоном. Данный факт позволяет объяснить эффект сверхпроводимости.

Явление сверхпроводимости заключается в скачкообразном падании сопротивления металла (электроны перестают взаимодействовать с решёткой) при его охлаждении до очень низкой температуры.

Данный эффект объясняется следующим образом. Пусть есть два электрона, движущиеся в кристаллической решётке металла. Они находятся на небольшом расстоянии друг от друга (несколько десятков ангстрем). За счёт наличия решётки электроны начинают взаимодействовать. При высоких температурах тепловые колебания решётки разрушают взаимодействие электронов и их можно рассматривать как независимые квантовые частицы (то есть их спины могут быть любыми). При низкой температуре образуется куперовская пара – два коррелированных между собой электрона. Тогда можно ввести общий для электронов спин, равный нулю или единице. Таким образом, куперовские пары являются бозонами, которые при низких температурах могут испытывать конденсацию. В состоянии Бозе-Эйнштейновского конденсата система из электронов протекает через металлы, не взаимодействуя с ним.

Аналогично объясняется явление сверхтекучести.

## Лекция 12. Теория возмущений.

### Теория возмущений

Для стационарных и нестационарных уравнений Шрёдингера в большинстве случаев нет точного решения (даже для простейших систем). Однако, существуют подходы приближённого решения уравнений. Один из таких методов - теория возмущений.

Рассмотрим гамильтониан невозмущённой системы. Для него можно найти некоторое решение (некоторый набор ортонормированных волновых функций). Для стационарного случая можно записать:

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \quad (12.1)$$

Пусть на систему, которая описывается гамильтонианом  $\hat{H}_0$  оказывается воздействие, причём полный гамильтониан можно представить в виде суммы:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (12.2)$$

где  $\hat{V}$  - возмущение.

Пусть система невырождена, то есть уровни энергии невырождены и каждой энергии  $E_n^{(0)}$  соответствует функция  $\psi_n^{(0)}$ .

Предположим, что возмущение  $\hat{V}$  мало (в противном случае волновые функции системы не могут быть похожи на волновые функции невозмущённой системы). Тогда можно утверждать, что при

$$\hat{V} \rightarrow 0 \Rightarrow \psi_n \rightarrow \psi_n^{(0)} \quad (12.3)$$

где  $\psi_n$  - решение полной задачи:

$$\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n \quad (12.4)$$

Представим решение в виде линейной комбинации исходных волновых функций:

$$\psi_m = \sum C_n \psi_n^{(0)} \quad (12.5)$$

Подставим данное разложение в (12.4) и учтём, что для каждой из функций  $\psi_n^{(0)}$  выполняется уравнение Шрёдингер (12.1):

$$\sum_n (E_m - \hat{H}_0) C_n \psi_n^{(0)} = \sum_n \hat{V} C_n \psi_n^{(0)} \Big| \psi_k^{(0)*} \quad (12.6)$$

Домножим полученное уравнение на  $\psi_k^{(0)*}$  и проинтегрируем по области определения задачи левую и правую часть.

Учтём, что  $\psi_n^{(0)}$  - набор ортонормированных функций. Тогда получим

$$C_k \left( E_m - E_k^{(0)} \right) = \sum_n V_{kn} C_n \quad (12.7)$$

где  $V_{kn}$  - матричный элемент оператора  $\hat{V}$ :

$$V_{kn} = \int \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} dV \quad (12.8)$$

Таким образом, мы получили уравнение (12.7) относительно  $C_n$  и  $C_k$ . Задача о нахождении волновой функции свелась к задаче о нахождении коэффициентов.

Распишем энергию уровня в виде:

$$E_m = E_m^{(0)} + E_m^{(1)} + E_m^{(2)} + \dots \quad (12.9)$$

где  $E_m^{(i)}$  - поправка  $i$ -го порядка малости.

Возмущение слабое, поэтому отличие энергии конечного состояния от энергии невозмущённого состояния (без возмущения) мало и описывается рядом.

Аналогично, для коэффициентов можно написать

$$C_m = C_m^{(0)} + C_m^{(1)} + \dots \quad (12.10)$$

Подставим данные разложения в уравнение (12.7), сгруппируем величины одного порядка малости и составим для каждого порядка малости своё уравнение. Так, для нулевого порядка малости (здесь учтено, что величина  $V_{kn}$  всегда хотя бы первого порядка малости)

$$C_k^{(0)} \left( E_m^{(0)} - E_k^{(0)} \right) = 0 \quad (12.11)$$

Отсюда следует:

$$C_k^{(0)} = \delta_{km} \quad (12.12)$$

Уравнение для первого порядка малости:

$$C_k^{(0)} E_m^{(1)} + C_k^{(1)} E_m^{(0)} - C_k^{(1)} E_m^{(0)} = \sum_n V_{kn} C_n^{(0)} \quad (12.13)$$

Подставим (12.12) в (12.13). Тогда получаем:

$$\delta_{km} E_m^{(1)} + C_k^{(1)} \left( E_m^{(0)} - E_k^{(0)} \right) = V_{km} \quad (12.14)$$

Рассмотрим два случая:

$$k = m \Rightarrow E_m^{(1)} = V_{km} \quad (12.15)$$

Таким образом, получили поправку к энергии системы в первом порядке теории возмущений.

$$k \neq m \Rightarrow C_k^{(1)} = \frac{V_{km}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (12.16)$$

Запишем условие нормировки волновой функции:

$$\int |\psi_m|^2 dV = 1 \quad (12.17)$$

При этом нам известно разложение

$$\psi_m = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} \quad (12.18)$$

Подставим (12.18) в (12.17) и получим

$$\int |\psi_m|^2 dV = 1 \simeq 1 + C_m^{(1)} + C_m^{(1)*} \quad (12.19)$$

Отсюда получим

$$C_m^{(1)} = -C_m^{(1)*} \quad (12.20)$$

тогда коэффициенты должны быть чисто мнимыми:

$$Re C_m^{(1)} = 0 \quad (12.21)$$

Тогда у данной величины должна быть некоторая фаза, которая с точки зрения вероятности неважно, поэтому можно положить  $0 = C_m^{(1)} = -C_m^{(1)*}$ .

Таким образом, в первом приближении теории возмущений решение найдено (нашли коэффициенты, значит, знаем и разложения функций и энергий). Полный вид волновой функции в первом порядке теории возмущений:

$$\psi_m^{(1)} = \sum_{n \neq m} \frac{V_{nm}}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \psi_n^{(0)} \quad (12.22)$$

Отсюда получаем, что такое разложение справедливо, если выполнено  $\frac{V_{nm}}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \ll 1$  (так как основная часть волновой функции - первый член - равна  $\psi_n^{(0)}$ ).

Таким образом, условие применимости разложения для теории возмущений:

$$\left| V_{nm} \right| \ll \left| E_m^{(0)} - E_n^{(0)} \right| \quad (12.23)$$

Однако, для широкого класса волновых функций первого приближения недостаточно (соответствующие матричные элементы могут быть равны нулю).

Аналогично можно получить поправки к энергии во втором порядке теории возмущений:

$$E_m^{(2)} = \sum_{n \neq m} \frac{V_{mn} V_{nm}}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (12.24)$$

## Атом водорода

Рассмотрим решение задачи для атома водорода с точки зрения теории возмущений.

1. Ранее мы считали, что электрон движется в центральном поле точечного кулоновского центра. Однако на самом деле ядро не точечное, его размер конечен. Тогда зависимость потенциала будет отличаться от кулоновского потенциала. На больших расстояниях потенциал будет совпадать с кулоновским, а в области порядка размера ядра будет потенциал, создаваемый заряженным шариком. Например, если представить ядро за заряженный металлический шарик, то потенциал будет иметь вид:

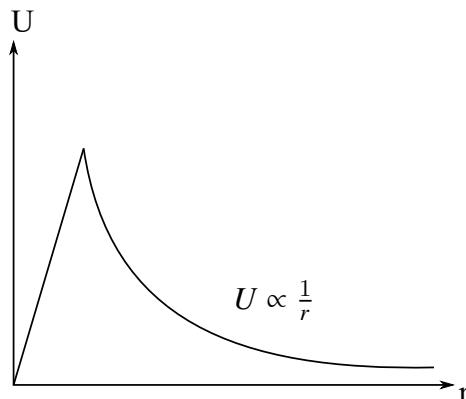


Рис. 12.1: Потенциал заряженного ядра

Таким образом, можно говорить о возмущении потенциала в области ядра. Тогда реальный потенциал можно представить в виде разницы кулоновского потенциала  $U_k$  и потенциала у ядра  $U_*$ :

$$U = U_k - U_*$$

2. При предыдущем рассмотрении мы пренебрегали релятивистскими эффектами. Учтём этот факт. Запишем энергию в виде:

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} = m^2 c^4 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}} \quad (12.25)$$

Полученное выражение можно разложить в ряд Тейлора, так как  $\frac{p^2}{m^2 c^2} \ll 1$ .

Вычтем из полной энергии энергию покоя, получим кинетическую энергию:

$$E - mc^2 = K = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^2/2m}{mc^2} \quad (12.26)$$

Из первого разложения в ряд получаем первую поправку к кинетической энергии -  $\frac{p^2/2m}{mc^2}$ .

Таким образом, можно записать:

$$K = K_0 - \frac{K_0^2}{mc^2}$$

3. В атоме существует два угловых и два магнитных момента. Магнитные моменты между собой взаимодействуют, при этом любое магнитное взаимодействие есть релятивистское взаимодействие. Поэтому появляется ещё одна поправка, связанная с учётом  $ls$  взаимодействия (взаимодействие спинового момента атома с наведённым магнитным полем, которое наведено угловым моментом).

Последние два эффекта ведут к возникновению тонкой структуры атома водорода.

Рассмотрим второй и третий пункты подробнее. Запишем полный гамильтониан системы:

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U} = \hat{H}_0 - \hat{V} \quad (12.27)$$

где  $\hat{V} = \frac{K_0^2}{mc^2}$ .

Значит, изменение энергии в первом порядке теории возмущений

$$\Delta E = V_{mn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_m^{(0)} d\vec{r} \quad (12.28)$$

После вычисления интеграла получим:

$$\Delta E_l = \frac{\alpha^2 Z^2}{n} E_{nl}^{(0)} \left( \frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \quad (12.29)$$

Таким образом, учёт релятивистской поправки снимает вырождение по квантовому числу  $l$ .

Можно доказать, что магнитное поле, которое даст ядро (в системе отсчёта, связанной с электроном) имеет вид:

$$\tilde{H} = \frac{1}{\varepsilon} [\vec{\varepsilon}, \vec{v}] \quad (12.30)$$

где  $\varepsilon$  - кулоновское поле, создаваемое атомом.

Тогда матричный элемент будет определяться как

$$V_{nm} = -\left(\mu_s \tilde{H}\right) \quad (12.31)$$

где  $\mu_s$  - магнитный момент, связанный со спином.

Таким образом, мы посчитали энергию взаимодействия спинового магнитного момента с магнитным полем, наведённым кулоновским полем ядра, вращающимся вокруг электрона.

Тогда, посчитав два полученных вклада в энергию, получим:

$$\Delta E = -\frac{\alpha^2 Z^4 R}{n^3} \left( \frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \quad (12.32)$$

Эта формула определяет тонкую структуру атома.

## Атом гелия

Воспользуемся теорией возмущений для решения задачи об атоме гелия. Однако следует отметить, что несмотря на фундаментальные результаты, которые будут получены, вообще говоря теория возмущений не способна дать корректный ответ. Запишем гамильтониан системы в виде:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_0} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_0} + U(r_1) + U(r_2) + U(r_1 - r_2) \quad (12.33)$$

где  $\frac{\hat{p}_i^2}{2m_0}$  - кинетическая энергия каждого из двух электронов,  $U(r_i)$  - потенциальная энергия взаимодействия каждого из электронов с ядром,  $U(r_1 - r_2)$  - кулоновское взаимодействие электронов между собой.

Сперва пренебрежем поправкой  $U(r_1 - r_2)$  и запишем уравнение

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (12.34)$$

и подставим в уравнение Шрёдингера гамильтониан (без  $U(r_1 - r_2)$ ). Тогда можно получить разделение переменных (относительно  $r_1$  и  $r_2$ ). Это соответствует ситуации, в которой электроны движутся в кулоновском поле независимо друг от друга. Так как можно произвести разделение переменных, то можно получить два независимых уравнения (так как обе части полученного уравнения можно приравнять некоторой константе):

$$\lambda = \left( \dots \right)(r_1) = \left( \dots \right)(r_2) \quad (12.35)$$

Таким образом, волновую функцию (в описанной ситуации) можно представить в виде (а и б - электроны):

$$\psi = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2) \quad (12.36)$$

Учтём, что волновая функция электрона имеет координатную и спиновую части (знак зависит от направления спина):

$$\psi_a = \psi_a(1)S^\pm(1) \quad (12.37)$$

$$\psi_b = \psi_b(2)S^\pm(2) \quad (12.38)$$

Для атома гелия есть несколько вариантов совместной волновой функции (возможные комбинации спинов):

$$S^+(1) S^+(2) \quad (12.39)$$

$$S^+(1) S^-(2) \quad (12.40)$$

$$S^-(1) S^+(2) \quad (12.41)$$

$$S^-(1) S^-(2) \quad (12.42)$$

Однако, стоит учесть, что случаи (12.40) и (12.41) не соответствуют принципу неразличимости частиц (при замене электронов местами мы будем знать, какой электрон каким номером называется). Вместо них нужно построить функции типа:

$$S^+(1)S^-(2) \pm S^+(2)S^-(1) \quad (12.43)$$

Для случаев (12.39) и (12.42) полный спин  $S = 1$ , в (12.43) если стоит знак минус, то спин равен нулю ( $- \rightarrow S = 0$ ), если знак плюс, то спин равен единице ( $+ \rightarrow S = 1$ ).

Таким образом, имеем четыре возможных варианта спиновой функции, из которых три - триплетных состояния ( $S = 1$ ) и один синглетный ( $S = 0$ ). Триплетные состояния являются симметричными, синглетное - антисимметричным.

Построим полную антисимметричную волновую функцию:

$$\psi(1, 2) = (\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1))(ss - ss) \quad (12.44)$$

$$\psi(1, 2) = (\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)) \cdot (S = 1) \quad (12.45)$$

(в (12.46) симметричная координатная функция умножается на антисимметричное состояние, в (12.47) антисимметричная координатная функция умножается на одно из триплетных состояний. Если умножать симметричные функции на симметричные (и наоборот), то полученная функция не будет удовлетворять принципу Паули.)

Запишем возмущение:

$$U(r_1 - r_2) = \frac{e^2}{r_{12}} \quad (12.46)$$

Тогда поправка в первом порядке теории возмущений:

$$E_m^{(1)} = \frac{\int \psi^*(1, 2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi(1, 2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{\int \psi^*(1, 2) \psi(1, 2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2} \quad (12.47)$$

Для любой волновой функции спиновая часть не зависит от  $\mathbf{r}$ , поэтому она выносится из-под знака интеграла (в числителе и знаменателе) и сокращается.

Распишем произведение:

$$\begin{aligned} \psi^*(1, 2) \psi(1, 2) &= \psi_a(1) \psi_b^*(2) \psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_a(2) \psi_b^*(1) \psi_a(1) \psi_b(2) \pm \\ &\pm \left( \psi_a^*(1) \psi_b^*(2) \psi_a(2) \psi_b(1) + \psi_a(1) \psi_b(2) \psi_a^*(2) \psi_b^*(1) \right) \end{aligned} \quad (12.48)$$

Отметим, что  $\psi_a$  и  $\psi_b$  составляют ортонормированный базис, поэтому при интегрировании по пространству первые два члена дадут единицу, а последнее слагаемое (в больших скобках) в силу ортонормированности даст символ Кронекера. Таким образом, интеграл в знаменателе равен

$$\int \psi^*(1, 2) \psi(1, 2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = 2 + 2\delta_{ab} \quad (12.49)$$

При вычислении интеграла в числителе тоже получим четыре интеграла, причём интегралы будут попарно равны. Обозначим:

$$\int \text{II} = \int \text{I} = C \quad (12.50)$$

$$\int \text{III} = \int \text{IV} = A \quad (12.51)$$

где  $\int \text{II}$  - второй интеграл (и т.д.).

Можно показать, что первые два интеграла  $\int \text{I}$  и  $\int \text{II}$ , где

$$\int \text{I} = \int \psi_a(1) \psi_b^*(2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_a(1) \psi_b(2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

есть средняя кулоновская энергия взаимодействия двух облаков электронов.

Однако для интегралов  $\int \text{III}$  и  $\int \text{IV}$  нет классического аналога. Они представляют собой некоторую дополнительную энергию, возникающую вследствие того, что нам неизвестно, какой электрон где находится. В процессе взаимодействия конкретный электрон сначала находится в состоянии  $a$ , потом перескакивает в состояние  $b$ . Появляется некоторая дополнительная энергия, связанная с этим обменным взаимодействием. Описанная величина называется обменной энергией. Этот эффект квантово-механический (нет классического аналога), он связан с тем, что электроны неразличимы и перескакивают из одного состояния в другое.

Таким образом, если

$$a \neq b \Rightarrow E^{(1)} = C \pm A \quad (12.52)$$

$$a = b \Rightarrow E^{(1)} = C = A \quad (12.53)$$

Энергия в первом порядке теории возмущений зависит от того, находятся ли электроны одном и том же состоянии.

Если электроны находятся в разных состояниях, выполняется (12.52). Знаки  $\pm$  в (12.52) соответствуют разным величинам полного спинового момента двух электронов. Плюс соответствует три симметричных волновых функции ( $S = 1$ ), а знаку минус - одна антисимметричная волновая функция ( $S = 0$ ).

Если электроны находятся в одном и том же состоянии, то в силу принципа Паули, их спины должны быть разными, то есть может быть только синглетное состояние.

Однако применение теории возмущений в данном случае приводит к противоречию. Собственная кулоновская энергия в атоме водорода выражается формулой, аналогичной формуле для А (вместо  $r_{12}$  в формуле присутствует  $r$ ). Так как расстояние между электроном и ядром и расстояние между электронами примерно одинаковы, интегралы С и А оказываются порядка кулоновской энергии электрона в атоме водорода. Поэтому получаем, что сдвиг уровня порядка энергии самого уровня. Значит, в данной задаче теорию возмущений применять нельзя.

## Задачи теории возмущений

Рассмотрим некоторые задачи, которые можно решать с помощью теории возмущений.

Одна из них - задача о ангармоническом осцилляторе. Пусть потенциал взаимодействия вблизи точки равновесия можно представить как

$$U(x) = U_0 + \alpha x + \beta x^2 + \gamma x^3 + \dots \quad (12.54)$$

Первое слагаемое можно подложить  $U_0 = 0$ , так как ноль отсчёта потенциала можно выбрать произвольно.

Так как разложение происходит в точке равновесия, второе слагаемое  $\alpha x = 0$ , так как первая производная в точке равновесия должна быть равна нулю.

Слагаемое  $\beta x^2$  даёт силу, пропорциональную смещению (сила Гука). Таким образом, первые три слагаемых разложения дают обычный гармонический потенциал. Слагаемые  $\gamma x^3$  и следующие называются ангармонизмом.

Считаем, что в нулевом приближении есть гармонический осциллятор. Зная решения для гармонического осциллятора, можно посчитать поправки к энергии гармонического осциллятора, связанные с его ангармонизмом.

Решение с помощью теории возмущений используется и для рассмотрения молекул. Если считать, что энергия электронов в атоме - это базовая волновая функция, то изменение энергии электронов в молекуле можно учесть в рамках теории возмущений, считая, что вращательные и колебательные степени свободы являются малыми поправками.

## Лекция 13. Релятивистская квантовая теория.

### Уравнение Клейна — Гордона — Фока

Запишем уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \quad (13.1)$$

Можно доказать, что для преобразования Галилея

$$x' = x - vt \quad (13.2)$$

$$y' = y \ z' = z \ t' = t \quad (13.3)$$

уравнение Шрёдингера инвариантно. Посмотрим, инвариантно ли уравнение Шрёдингера при преобразованиях Галилея:

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (13.4)$$

Оказывается, что в штрихованной системе координат уравнение примет другой вид (так как уравнение Шрёдингера справедливо в нерелятивистском случае. Нельзя описывать релятивистские эффекты в рамках уравнения Шрёдингера). Значит, необходимо другое уравнение, описывающее релятивистский случай.

Введём оператор перемещения во времени (он имеет смысл изменения энергии системы):

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (13.5)$$

Тогда уравнение Шрёдингера - закон изменения энергии.

В нерелятивистском случае энергия

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (13.6)$$

В релятивистском случае -

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (13.7)$$

Заменим Е и p в указанном уравнении на соответствующие операторы. И воспользуемся описанным выше подходом построения уравнения.

В результате получим уравнение для свободной частицы:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \left( -c^2 \hbar^2 \nabla^2 + m_0^2 c^4 \right) \psi \quad (13.8)$$

Можно доказать, что данное уравнение оказывается инвариантным относительно преобразования Лоренца.

Полученное уравнение (13.8) носит название уравнения Клейна — Гордона — Фока. Оно описывает волновую функцию релятивистской частицы.

Введём

$$k^2 = \frac{m_0 c^4}{\hbar^2} \quad (13.9)$$

Тогда (13.8) сводится к уравнению

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - k_0^2 \psi = 0 \quad (13.10)$$

Первые два слагаемых данного уравнения представляют собой уравнение Даламбера, третье слагаемое - инвариантный скаляр. Отсюда видно, почему уравнение является инвариантным относительно преобразований Лоренца.

## **Уравнение непрерывности и плотность вероятности для уравнения Клейна — Гордона — Фока**

Получим уравнение непрерывности для плотности вероятности. Для этого возьмём комплексное сопряжение от обеих частей уравнения (13.10) и возьмём разность полученного уравнения и уравнения (13.10), домноженного на  $\psi^*$  слева. В результате получим

$$\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* - \frac{1}{c^2} \left( \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial t^2} \right) = 0 \quad (13.11)$$

Обозначим

$$\rho = \frac{ie\hbar}{2m_0 c^2} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \quad (13.12)$$

Тогда

$$\frac{2m_0}{ie\hbar} \frac{d}{dt} \rho = \frac{1}{c^2} \left( \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial t^2} \right) \quad (13.13)$$

Обозначим

$$j = \frac{ie\hbar}{2m_0} \left( \psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi \right) \quad (13.14)$$

Тогда получаем уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0 \quad (13.15)$$

Заметим, что по определению  $\rho$  - плотность вероятности. Поэтому эта величина должна быть положительной. Однако уравнение Клейна - Гордона - Фока — уравнение в частных производных второго порядка, поэтому выбором граничных условий разность в определении (13.12) можно сделать любой (в начальный момент времени). То есть плотность

вероятности может быть отрицательной.

Убедимся, что (13.12) сводится к нерелятивистскому выражению, вытекающему из уравнения Шрёдингера. Для этого разложим энергию в ряд Тейлора:

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = m_0 c^2 \left(1 + \frac{v^2}{mc^2}\right) \quad (13.16)$$

и посчитаем величину  $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ , учитывая, что волновая функция  $\partial t \tilde{\psi}(r) e^{\frac{i}{\hbar} Et}$ .

Подставляя полученное выражение в (13.12), получим нерелятивистскую форму для плотности вероятности:

$$\rho = e\psi^* \psi \quad (13.17)$$

Уравнение Клейна — Гордона — Фока описывает фотоны . Однако, для частиц данное уравнение неприменимо.

## Уравнение Дирака

Запишем формулу для релятивистской энергией:

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (13.18)$$

Проблема, появляющаяся в уравнении Клейна — Гордона — Фока обоснована тем, что это уравнение в частных производных второго порядка. Чтобы избавиться от второго порядка, запишем уравнение, в которое  $E$  и  $p$  будут входить в первой степени. Для этого запишем

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (13.19)$$

В релятивистской механике частицы описываются 4-векторами. Компоненты импульса -  $p_0 = m_0 c, p_1, p_2, p_3$ . Формально запишем энергию в виде

$$E = c \sum_{\mu=0}^3 \alpha_\mu p_\mu \quad (13.20)$$

где  $c$  - нормировочная константа.

Тогда

$$E^2 = A^2 \sum_{\mu} \sum_{\mu'} \alpha_\mu \alpha_{\mu'} p_\mu p_{\mu'} = \frac{A^2}{2} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} (\alpha_\mu \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_\mu) p_\mu p_{\mu'} = c^2 (p_0^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) \quad (13.21)$$

При этом  $\alpha_\mu$  представляет собой матрицу (так как энергия и импульс - 4-вектор).

Сравним правую и левую часть (относительно последнего знака равенства) уравнения

(13.21). Отсюда

$$\alpha_\mu^2 = 1 \text{ при } A = c \quad (13.22)$$

$$\alpha_\mu \alpha_{\mu'} = -\alpha_{\mu'} \alpha_\mu \quad (13.23)$$

(последнее равенство должно выполняться, так как  $\alpha_\mu \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_\mu = 2\delta_{\mu'\mu}$ , чтобы избавиться от перекрёстных членов) В результате получим матрицы:

$$\alpha_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

При этом полученные матрицы являются эрмитовыми:

$$\alpha_\mu^+ = \alpha_\mu \quad (13.24)$$

Матрицы  $\alpha_i$ ,  $i = 0, 1, 2, 3$  называются матрицами Дирака. Они дают возможность выписать уравнения в явном виде.

Перейдём к операторной форме в уравнении (13.20). (это и будет уравнение Дирака)

$$\hat{E} = c \sum \alpha_\mu \hat{P}_\mu \quad (13.25)$$

Перепишем в виде:

$$\left( \hat{E} - c \sum \alpha_\mu \hat{P}_\mu \right) \psi = 0 \quad (13.26)$$

где  $\psi$  - 4-вектор (строка) (так  $\alpha_\mu$  - матрица  $4 \times 4$ ):

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Тогда

$$\psi^+ = (\psi_1 \ \psi_2 \ \psi_3 \ \psi_4)$$

## Формы уравнения Дирака и уравнение непрерывности

Получим другой вид уравнения Дирака. Запишем уравнение (13.26) как систему из четырёх уравнений первого порядка:

$$\left( \hat{E} - mc^2 \right) \psi_1 - c \left( \hat{p}_x - i \hat{p}_y \right) \psi_4 - c \hat{p}_z \psi_3 = 0 \quad (13.27)$$

$$\left( \hat{E} - mc^2 \right) \psi_2 - c \left( \hat{p}_x + i \hat{p}_y \right) \psi_3 + c \hat{p}_z \psi_4 = 0 \quad (13.28)$$

$$\left( \hat{E} - mc^2 \right) \psi_3 - c \left( \hat{p}_x - i \hat{p}_y \right) \psi_2 - c \hat{p}_z \psi_1 = 0 \quad (13.29)$$

$$\left( \hat{E} - mc^2 \right) \psi_4 - c \left( \hat{p}_x + i \hat{p}_y \right) \psi_1 + c \hat{p}_z \psi_2 = 0 \quad (13.30)$$

Введём вектор из трёх матриц:

$$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 \end{pmatrix}$$

Тогда уравнение Дирака преобразуется в

$$\hat{E} - \left( c(\alpha \hat{p}) - m_0 c^2 \rho_0 \right) \psi = 0 \quad (13.31)$$

где  $\rho_0 = \alpha_0$ .

Перепишем уравнение (13.31) в виде:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{e\hbar}{i} (\alpha \nabla) \psi - m_0 c^2 \rho_0 \psi = 0 \quad (13.32)$$

Далее проведём те же действия, что и ранее при выводе уравнения непрерывности, учитывая, что в данном случае необходимо проводить операцию эрмитова сопряжения, а не комплексного сопряжения.

Домножим (13.32) на  $\frac{ie}{\hbar} \psi^+$ :

$$\left( \frac{ie}{\hbar} \psi^+ \right) \cdot \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{e\hbar}{i} (\alpha \nabla) \psi - m_0 c^2 \rho_0 \psi \right) = 0 \quad (13.33)$$

Произведём операцию эрмитова сопряжения над (13.32) и умножим на  $\frac{ie}{\hbar} \psi$ .

$$\left( -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{e\hbar}{i} (\alpha \nabla) \psi - m_0 c^2 \rho_0 \psi \right)^+ = 0 \cdot \left| \frac{ie}{\hbar} \psi \right|^2 \quad (13.34)$$

Вычтем из (13.33) уравнение (13.34). В результате получим

$$\frac{\partial}{\partial t} (e \psi^* \psi) + \operatorname{div}(e c \psi^+ \alpha \psi) = 0 \quad (13.35)$$

Полученное уравнение и будет уравнением непрерывности, если положить  $\rho = e\psi^*\psi$  и  $e\psi^+\alpha\psi = j$ .

Заметим, что

$$\psi^+\psi = \psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2 + \psi_3^*\psi_3 + \psi_4^*\psi_4 > 0 \quad (13.36)$$

Поэтому  $\rho$  - положительно определенная.

## Решение уравнения Дирака для электрона в центральном поле

Рассмотрим движение релятивистского заряда в центральном поле. Запишем уравнение Дирака с учётом потенциальной энергии:

$$\left( \hat{E} - c(\alpha\hat{p}) - m_0c^2\rho_0 - \hat{U} \right) \psi = 0 \quad (13.37)$$

Запишем оператор момента импульса

$$\hat{M} = [\hat{r}\hat{p}] \quad (13.38)$$

и посчитает коммутатор:

$$[\hat{M}_z\hat{H}] = \frac{c\hbar}{i} \left( \alpha_1\hat{p}_y - \alpha_2\hat{p}_x \right) \neq 0 \quad (13.39)$$

Операторы  $\hat{M}_z$  и  $\hat{H}$  не коммутируют. Это означает, что момент импульса не является интегралом движения.

Однако, существует оператор, коммутирующий с оператором Гамильтона. Этим оператором будет оператор

$$\hat{M}_j = \hat{M} + \hat{S} \quad (13.40)$$

где оператор  $\hat{S}$  - матричный оператор вида

$$\hat{S} = \frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma} \quad (13.41)$$

где

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_x & \sigma_y & \sigma_z \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Таким образом, мы получили оператор спина в явном виде.

При этом проекция данного оператора на ось z равна 1/2. Длина оператора:

$$\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \quad (13.42)$$

Оказывается, что спин и оператор спина (и все его свойства) полностью вытекают из уравнения Дирака математически.

Оказывается, что  $\psi_1, \psi_3$  соответствуют одной ориентации спина, а  $\psi_2, \psi_4$  - другой ориентации.

## Решение уравнения Дирака для свободной частицы

Пусть частица движется вдоль оси z:  $p_z \neq 0, p_x = p_y = 0$ .

Будем искать решение в виде:

$$\psi_i(r, t) = Ab_i e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_z z)} \quad (13.43)$$

По сути написанное выражение есть аналог функции де Бройля с учётом того, что волновая функция - 4-вектор. Подставим данное выражение в уравнение Дирака (в систему из четырёх уравнений):

$$(E - mc^2)b_1 - cp_z b_3 = 0 \quad (13.44)$$

$$(E - mc^2)b_2 + cp_z b_4 = 0 \quad (13.45)$$

$$(E - mc^2)b_3 - cp_z b_1 = 0 \quad (13.46)$$

$$(E - mc^2)b_4 - cp_z b_2 = 0 \quad (13.47)$$

Заметим, что  $b_1$  и  $b_3$  входят в (13.44) и (13.46), а  $b_2$  и  $b_4$  - в оставшиеся два уравнения. Таким образом, система распадается на две независимых системы линейных алгебраических уравнений. Условие нетривиального решения - определитель равен нулю. Взяв определитель любой из двух полученных систем, получим:

$$E^2 - m^2 c^4 - p_z^2 c^2 = 0 \quad (13.48)$$

Это означает

$$E^2 = m^2 c^4 + p_z^2 c^2 \quad (13.49)$$

Отсюда следует два возможных значения энергии:

$$E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + p_z^2 c^2} \quad (13.50)$$

Рассмотрим два случая:

1.  $E > 0$  Тогда получаем:

(a)  $b_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{mc^2}{E}}, b_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{mc^2}{E}}$   
 $b_2 = b_4 = 0$

(b)  $b_1 = b_3 = 0$   
 $b_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{mc^2}{E}}, b_4 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{mc^2}{E}}$

2.  $E < 0$

(a)  $b_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{mc^2}{|E|}}, b_3 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{mc^2}{|E|}}$   
 $b_2 = b_4 = 0$

(b)  $b_1 = b_3 = 0$   
 $b_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{mc^2}{|E|}}, b_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{mc^2}{|E|}}$

Рассмотрим случай  $E > 0$ . Тогда случаи (a) и (b) соответствуют двум разным проекциям спина.

Посчитаем

$$\frac{m_0 c^2}{E} = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \approx 1 - \frac{v^2}{2c^2} \quad (13.51)$$

и рассмотрим асимптотику коэффициентов при переходе к нерелятивистскому случаю.  
Тогда

1.  $b_1 = 1, b_2 = b_4 = 0, b_3 = \frac{v}{2c}$

Соответственно, в нерелятивистском пределе  $b_3 \rightarrow 0$ . От 4-вектора остаётся только одна функция, которая и будет уравнением Шрёдингера.

2.  $b_1 = b_3 = 0, b_2 = 1, b_4 = -\frac{v}{2c}$ .

В нерелятивистском пределе  $b_4 \rightarrow 0$ . Получаем, что для другой проекции спина соответствует функция  $\psi_2$ .

Таким образом, получаем, что спин, как релятивистская сущность сохраняется в нерелятивистском пределе (волновая функция зависит от проекции спина). То есть в нерелятивистском пределе релятивистские свойства сохраняются.

## Античастицы

Рассмотрим случай  $E < 0$ . Частица, для которой решение соответствует  $E < 0$  (а в остальном имеет свойства такие же, как у электрона), была названа позитроном.

Позже позитрон был обнаружен в опытах Андерсона. Позитрон - нестабильная частица. В некоторых случаях позитрон можно рассматривать как дырку в области отрицательных энергий - отсутствие электрона - которая ведёт себя как положительная частица.

Для любой элементарной частицы со спином 1/2 существует античастица.



## Опыт Лэмба - Резерфорда

Рассмотрим атом водорода; электрон находится в состоянии  $2s_{1/2}$  или в состоянии  $2p_{1/2}$ . Тогда с точки зрения уравнения Шредингера и с точки зрения уравнения Дирака энергия этих состояний одинакова. Есть тонкая структура, снимается вырождение по  $j$ , но не снимается вырождение по  $l$ .

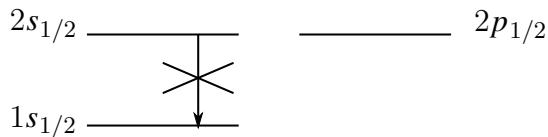


Рис. 13.1: Структура энергетических уровней

При этом переход  $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  запрещён. Если каким-то образом электрон попадает в состояние  $2s_{1/2}$ , то время жизни на восемь порядков больше времени жизни в состоянии  $2p_{1/2}$ . То есть, если облучить водород ультрафиолетовым излучением и возбуждаем на какой-то из двух указанных уровней, то те атомы, что попадут в  $2p_{1/2}$ , очень быстро вернутся в основное состояние, а атомы в состоянии  $2s_{1/2}$  будут жить там в  $10^8$  раз дольше.

Опыт Лэмба - Ризерфорда был поставлен следующим образом. Пучок атомов водорода облучался резонансным ультрафиолетовым излучением для возбуждения в одно из указанных состояний. После чего поток излучённых атомов попадает в мишень и измеряется ток. Если атом попал в  $2p_{1/2}$ , то за время пролёта до мишени он успевает вернуться обратно в основное состояние, и в итоге к мишени прилетит нейтральный невозбуждённый атом и фотон (тока не будет). Если атом оказался в состоянии  $2s_{1/2}$ , то он не успевает перейти в основное состояние, прилетает на мишень в возбуждённом состоянии. Тогда существует большая вероятность, что при столкновении энергия перехода будет передана какому-то свободному электрону в металле (в мишени). Как следствие, появится ток.

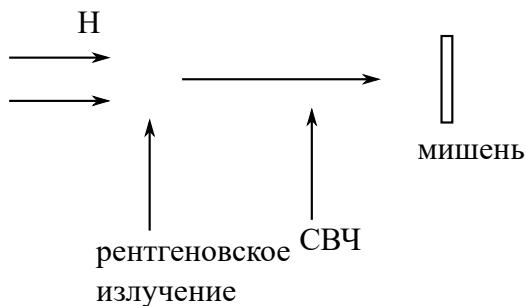


Рис. 13.2: Опыт Лэмба - Ризерфорда

Установим на пути излучённых атомов источник радиочастотного излучения. Тогда, если энергия уровней  $2s_{1/2}$  и  $2p_{1/2}$  действительно совпадает, то излучение не будет менять состояния атомов. Однако, если между указанными состояниями есть разница в энергии:  $|E_{2s_{1/2}} - E_{2p_{1/2}}| = \Delta$ , то при совпадении частоты радиочастотного излучения  $\omega_{\text{СВЧ}} = \Delta$

излучение начнёт вызывать переходы между уровнями (согласно квантовым уравнениям). При этом будет снято возбуждение (все атомы будут переходить в  $2p_{1/2}$  и успевать вернуться в основное состояние).

Таким образом, меняя частоту СВЧ генератора, будем наблюдать ток. При условии  $\omega_{\text{СВЧ}} = \Delta$  ток должен прекратиться (что и наблюдалось в эксперименте).

Таким образом была обнаружена сверхтонкая структура атома водорода - энергии уровней  $2s_{1/2}$  и  $2p_{1/2}$  разные. Существует дополнительное расщепление по квантовому числу  $l$ , которое не описывается теорией Дирака. Данное расщепление можно писать путём ввода дополнительных факторов (например, при учёте электромагнитного вакуума).



ФИЗИЧЕСКИЙ  
ФАКУЛЬТЕТ  
МГУ ИМЕНИ  
М.В. ЛОМОНОСОВА

*teach-in*  
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ