

Введение в квантовую физику

А.Н. Рубцов, П.А. Прудковский, С.П. Кулик

12 февраля 2013 г.

Предисловие

Основу предлагаемого пособия составили материалы лекций и семинарских занятий по курсу “Введение в квантовую физику”, который читается студентам второго курса физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова, начиная с 2009 года. Специфика чтения квантовой физики второкурсникам (причем в осенний, то есть первый семестр второго курса) состоит, прежде всего, в крайней ограниченности подготовки студентов как по математике, так и по другим областям физики. Фактически, “Введение в квантовую физику” опирается лишь на прочитанные в течение первого года обучения общие курсы математического анализа, линейной алгебры и механики. Естественно задаться вопросом, возможно ли обойтись столь скудным багажом и есть ли польза от такого раннего “квантового” курса. Трехлетний опыт работы позволяет нам ответить на оба этих вопроса положительно. Основным результатом чтения курса нам представляется знакомство студентов с базовыми понятиями, аппаратом, методологией, интерпретацией и некоторыми приложениями квантовой физики, которое должно привести к определенной трансформации студенческого взгляда на физику в целом. Действительно, переход от классической картины мира к квантовой в любом случае требует определенной “трансформации сознания”, и, безусловно, чем раньше она начнется, тем лучше. Платой за это являются методические сложности преподнесения материала, который не подкреплён соответствующими базовыми курсами, в первую очередь, физическими. Здесь, впрочем, также можно найти положительные стороны – у студентов в результате формируется представление о физике, как о цельной науке, а не о наборе независимых областей: в курсе имеются ссылки на соответствующие разделы. Заканчивая обсуждение вопроса о месте “Введения в квантовую физику” в общей системе курсов, следует подчеркнуть, что речь идет именно о “введении”, которое обязательно должно сопровождаться последующими более глубокими курсами, читаемыми по канонической схеме: общие – специальные курсы.

Вводный характер курса диктует необходимость избегать излишней математизированности или формализованности изложения, акцентируя внимание на физической стороне материала. В то же время, мы во всех случаях избегали бездоказательных утверждений, стремясь к тому, чтобы сильный студент мог воспроизвести все выкладки. Во многих случаях одно и то же утверждение звучит несколько раз на разных уровнях понимания – от декларативного до обоснованного. В качестве примеров можно привести обсуждение соотношений неопределенностей или копенгагенской интерпретации. Материал подобран таким образом, чтобы по возможности соблюсти баланс между изложением исторических сведений, основных понятий аппарата, а также традиционных и современных приложений квантовой теории (при этом, разумеется, обеспечивалось соответствие с утвержденной программой). Задачей-минимум являлось такое изложение, чтобы у студентов осталось впечатление о предмете курса как о современной, развивающейся области знаний. Примером служат разделы, в которых обсуждаются вопросы, связанные с квантовой телепортацией кубитов и проблемами квантовой коммуникации.

На лекциях материал излагался в последовательности, близкой к представленной в настоящем пособии: 16 лекций осеннего семестра распреде-

лялись приблизительно следующим образом: Глава 1: 2 лекции, Глава 2: 2 лекции, Глава 3: 4 лекции, Глава 4: 5 лекций, Глава 5: 3 лекции. Каждая лекция сопровождается семинарским занятием. Чтобы не перегружать лекции формальным материалом, некоторые темы полностью отнесены на семинары (например, вопрос об операторной алгебре в квантовой механике, а также обсуждение неравенств Белла); однако, эти темы используются в последующем лекционном материале и входят в курс необходимым образом.

Авторы благодарны П.В. Елютину и А.А. Федянину, принявшим участие в разработке курса, а также А.М. Шакирову за помощь в редактировании конспектов лекций.

Оглавление

1 Корпускулярные свойства света. История возникновения квантовой физики	6
1.1 Постоянная Планка	7
1.2 Формула Планка	8
1.3 Работы Эйнштейна	9
1.4 Шкала масштабов квантовой физики	12
1.5 Дальнейшая история развития квантовой физики	14
1.6 Опыты Юнга, Винера и другие свидетельства волновой природы света	15
1.7 Эффект Комптона	16
1.8 Волновые пакеты	17
1.9 Соотношения неопределенностей	18
1.10 Соотношения неопределенностей для фотонов	19
1.11 Закон Вина	19
1.12 Вероятность в квантовой теории	21
Дополнительный материал и задачи для семинарских занятий: . .	23
1.A Формула Планка. Законы фотоэффекта	23
1.B Размерности. Атомная система единиц.	23
1.C Интеграл Фурье.	24
1.D Когерентность	25
2 Волновые свойства частиц. Волновая функция и уравнение Шредингера.	29
2.1 Модель атома Бора	30
2.2 Волновые свойства частиц. Гипотеза де Бройля и эксперимент Дэвиссона-Джермера	32
2.3 Волновая функция	33
2.4 Уравнение Шредингера	34
2.5 Вывод уравнений движения волнового пакета	36
Дополнительный материал и задачи для семинарских занятий: . .	38
2.A Операторная алгебра в квантовой механике.	38
3 Простейшие модели квантовой механики	41
3.1 Стационарное уравнение Шредингера	42
3.2 Стационарные состояния свободной частицы	42
3.3 Прямоугольная потенциальная яма. Дискретный спектр	43
3.4 Симметрия волновых функций	47

3.5	Прямоугольный потенциальный барьер: состояния непрерывного спектра	47
3.6	Теория α -распада	51
3.7	Спектр квантового гармонического осциллятора	52
3.8	Термодинамика гармонического осциллятора	54
3.9	Вывод формулы Планка	56
3.10	Понятие о вырождении в системах со сферической симметрией. Трехмерный гармонический осциллятор	58
3.11	Радиальная часть оператора Лапласа	60
3.12	Угловая часть оператора Лапласа. Оператор момента.	61
3.13	Свойства компонент оператора момента	62
3.14	Уравнение для радиальной части волновой функции и классификация состояний	66
	Дополнительный материал и задачи для семинарских занятий: . . .	67
3.A	Одномерное движение	67
3.B	Движение в центральном поле	68
4	Системы многих частиц. Строение материи	71
4.1	Спектр атома водорода	72
4.2	Другие водородоподобные системы	73
4.3	Спин электрона. Принцип Паули	74
4.4	Заполнение электронных оболочек	76
4.5	Спектры атомов щелочных металлов	77
4.6	Правило Маделунга. Атомы побочных групп	78
4.7	Рентгеновские термы	79
4.8	Механизмы связи в молекулах	79
4.9	Природа ионной связи	79
4.10	Природа ковалентной связи	81
4.11	Колебательные спектры молекул	82
4.12	Вращательные спектры молекул	84
4.13	Фононы. Закон дисперсии в одномерной цепочке	85
4.14	Теплоемкость фононного газа. Понятие о теории Дебая	87
4.15	Электрон в периодическом потенциале. Теорема Блоха. Основы зонной теории	89
4.16	Закон дисперсии. Разрешенные и запрещенные зоны	89
4.17	Электроны и дырки в полупроводниках. Эффективная масса	92
4.18	Движение волнового пакета в среде с произвольным законом дисперсии. Фазовая и групповая скорость	93
4.19	Размерное квантование. Понятие о наноструктурах	94
4.20	Понятие тождественных частиц. Статистики Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака	95
4.21	Понятие о Бозе-Эйнштейновской конденсации	98
4.22	Распределение Ферми-Дирака в вырожденном случае	99
5	Квантовая электроника	101
5.1	Уравнение Шредингера с переменным внешним полем. Теория возмущений	102
5.2	Случай точного резонанса. Вынужденные переходы. Золотое правило Ферми	104
5.3	Спонтанные переходы. Коэффициенты Эйнштейна	105

5.4	Лазеры	107
5.5	Переходы в непрерывном спектре. Синхротронное излучение и лазер на свободных электронах	109
	Дополнительный материал и задачи для семинарских занятий: . .	110
5.A	Переходы под действием внешнего поля	110
6	Квантовая информация	111
6.1	Квантовая информация	112
6.2	Кубиты	114
6.3	Приготовление и преобразование состояний	116
6.4	Криптография. Квантовое распределение ключа	118
6.5	Протокол BB84	122
6.6	Парадокс ЭПР. Копенгагенская интерпретация квантовой ме- ханики	126
6.7	Неравенства Белла	128
	Дополнительный материал и задачи для семинарских занятий: . .	130
6.A	Квантовая телепортация	130

Глава 1

Корпускулярные свойства света. История возникновения квантовой физики

1.1 Постоянная Планка

Настоящий курс лекций посвящен совершенно новой для второкурсника области - квантовой физике. Приступая к его изучению, уместно сразу задаться вопросом – что же, в первую очередь, отличает эту новую область от остальных? Можно представить себе множество ответов на этот вопрос. Например, в научно-популярной литературе приняты описательно-философские определения ('в квантовом мире все происходит по законам теории вероятности' или 'все величины изменяются маленькими дискретными порциями'). Не говоря о том, что подобные определения попросту неверны, они еще и бессодержательны – в точных науках словесные рассуждения наполнены смыслом только тогда, когда они сопровождаются те или иные математические выражения.

Означает ли сказанное, что основным отличием квантовой физики является специальный математический аппарат? В определенном смысле, безусловно, да – в ходе изучения нашего курса на сцене появятся совершенно новые уравнения, содержащие не встречавшиеся ранее величины. Но и такое определение квантовой физики 'от формализма' сложно признать хорошим. А вдруг перед нами просто другой способ описания уже известных явлений? Кроме того, само понятие 'специального' математического формализма довольно размыто. Существует как минимум три внешне разных, но математически эквивалентных формулировки квантовой механики – но ведь никому в голову не придет из-за этого говорить о трех областях физики!

Существует, однако, еще одна характеристика, позволяющая разделить разные области физики. Это – *фундаментальных константы*, с которыми оперирует теория. Разумеется, если известны уравнения той или иной теории, они включают в себя и необходимые константы. Важно, однако, что знание фундаментальных констант представляет важность и безо всяких уравнений, поскольку позволяет определить *шкалу масштабов*.

Поясним сказанное на известном простом примере определения периода обращения Земли вокруг Солнца. Допустим, мы забыли законы Ньютона и закон всемирного тяготения, но располагаем совершенными средствами измерений, так что нам известна масса Солнца $M \approx 2 \cdot 10^{30}$ кг и среднее расстояние от него до Земли $R \approx 1.5 \cdot 10^{11}$ м. Можем ли мы на основании этой информации определить, сколько секунд длится земной год? Нет, просто потому, что комбинируя любые степени величин с размерностью массы и расстояния, мы никогда не получим величину с размерностью времени! Можно сколько угодно уточнять известную нам информацию, включать в рассмотрение результаты других измерений (скажем, эксцентриситет орбиты Земли) – ситуация от этого не изменится. Поэтому, безо всяких формул и законов, просто на основании соображений размерности, приходится заключить, что теория должна содержать константу, позволяющую, в комбинации с M и R , получить ответ в секундах. Эта константа - гравитационная постоянная $G = 6.673 \cdot 10^{-11} \text{ м}^3 \text{ кг}^{-1} \text{ с}^{-2}$. Искомая комбинация с размерностью времени имеет вид $\sqrt{\frac{R^3}{GM}} \approx 5 \cdot 10^6 \text{ с}$.¹ Мы видим, что теория

¹На самом деле продолжительность года составляет приблизительно $3.15 \cdot 10^7$ с, а формула для периода обращения по круговой орбите отличается от приведенного выражения множителем 2π . Определение этого множителя и входит в задачи математического

всемирного тяготения обязательным образом включает мировую константу - гравитационную постоянную.

Отличительным признаком квантовой физики является присутствие другой из мировых констант – *постоянной Планка* \hbar . Именно появление этой величины, имеющей размерность действия (то есть, произведения энергии на время), и предопределило начало революции, которая произошла в физике в начале XX века. Эта революция растянулась на десятилетия - от момента введения Планком новой постоянной до формулировки уравнений квантовой механики прошло почти 30 лет. А начиналось все в конце XIX века с попытки описать спектр излучения нагретых тел. С этой задачи начнем и мы.

1.2 Формула Планка

Обращаясь к событиям конца XIX века, не следует предполагать, что в то время физика отличалась от современной только тем, что определенные области (скажем, квантовая физика) были не известны. Сама картина физического знания еще не устоялась. В частности, М. Планк (M. Planck) с недоверием относился к гипотезе о существовании атомов, и в большей степени склонялся к версии континуальной картины мира. Атомарную же теорию он рассматривал как удобный способ описания наблюдаемых явлений. В вопросе об излучении света нагретыми телами его интересовал вопрос об эволюции энтропии в природе – и, соответственно, вопрос обоснования законов термодинамики. При этом, не вполне доверяя атомарной теории, Планк рассматривал твердое тело как совокупность некоторых эффективных осцилляторов, и обосновывал экспериментальные данные для законов излучения, строя выражения для энтропии этих осцилляторов.

Первоначально экспериментальные данные, полученные В. Виемом (W. Wien), указывали на то, что спектр излучения нагретого до температуры T тела имеет вид $I = \frac{a\omega^3}{e^{b\omega/T}}$ (здесь a, b – константы, ω – циклическая частота). Планку удалось найти простое выражение для энтропии элементарного осциллятора, позволяющее воспроизвести такой спектр. При этом, Планк ввел в теорию новую константу, имеющую размерность ‘энергия/частота’, то есть ‘действие’. Он обозначил эту величину буквой h . Подгонка данных для излучения нагретых тел дала $h = 6.55 \cdot 10^{-27}$ эрг·с. Современное значение этой константы - $6.626 \cdot 10^{-27}$; выше мы использовали более употребительную в современной физике величину $\hbar \approx 1.054 \cdot 10^{-27}$ эрг·с = $1.054 \cdot 10^{-34}$ Дж·с, которая отличается от h коэффициентом $1/2\pi$.

Полученные выражения представлялись Планку вполне логичными. Уже в этот момент Планк подозревал, что введенная им константа имеет важное значение для физики в целом. Однако, жизнь внесла свои коррективы. Более точные эксперименты показали отклонение спектра в инфракрасной области от установленного закона. Планку пришлось видоизменять теорию, а именно пересматривать выражение для энтропии элементарного осциллятора. Получилось! Новая теория приводила к формуле $\frac{a\omega^3}{e^{b\omega/T}-1}$ – выражению, получившему впоследствии название формулы Планка, которое прекрасно описывало всю совокупность известных экспериментальных данных. Эта

аппарата теории

же формула следует и из формул современной квантовой теории, ниже мы выведем ее. В современных обозначениях формула Планка для спектральной плотности мощности, излучаемой нагретой поверхностью единичной площади, имеет вид

$$\frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2c^2} \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (1.1)$$

(здесь c – скорость света, k – постоянная Больцмана). Результат был доложен 19 октября 1900 года на собрании Немецкого Физического Общества.

Но Планк не был удовлетворен. Он не мог понять физической природы нового выражения для энтропии элементарного осциллятора. В попытках получить удовлетворительное объяснение, Планк обратился к статистической теории Больцмана, интерпретирующей энтропию как величину, пропорциональную логарифму числа доступных состояний системы (то есть, использовал формулу Больцмана $S = k \ln Z$). До этого Планк считал энтропию самостоятельной физической величиной, аналогичной, например, энергии. Планк обнаружил, что необходимые выражения получаются, если предположить, что энергия элементарных осцилляторов меняется только дискретными порциями (квантами), пропорциональными их частоте. Коэффициент пропорциональности при этом должен быть равен введенной Планком ранее постоянной h . Интересно, что Планк и не помышлял об открытии новой области физики – дискретизация спектра элементарных осцилляторов представлялась ему математическим приемом, использованным, как он сам впоследствии писал, ‘от отчаяния’, после нескольких месяцев безуспешных попыток вывести необходимые выражения.

1.3 Работы Эйнштейна

Физическая значимость полученных Планком результатов стала ясна позже, когда в физике окончательно укрепилась идея об атомарном характере строения вещества, а с ними – и статистическая теория. Почти одновременно с Планком, Рэлей (J.W. Strutt, Baron Rayleigh) опубликовал формулу для излучения нагретых тел, основанную на классическом варианте статистической теории. К сожалению, он ошибся при определении числового коэффициента в этой формуле. Ошибка была исправлена Джинсом (J.H. Jeans) в

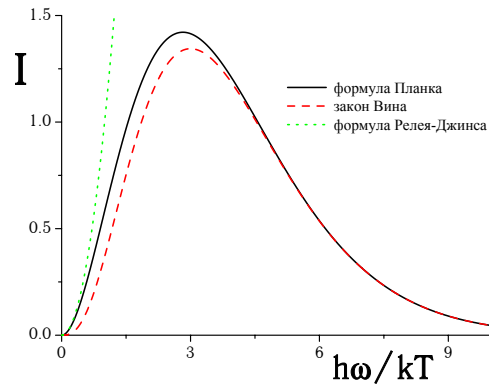


Рис. 1.1: Графики спектральной плотности мощности излучения нагретых тел, построенные по формулам Рэля-Джинса, Вина и Планка.

1905 году. Окончательное выражение (формула Рэля-Джинса) имеет вид

$$I = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT. \quad (1.2)$$

Нетрудно увидеть, в чем состоит качественное отличие этого выражения от формулы Планка – с ростом частоты формула Рэля-Джинса предсказывает бесконечный рост плотности мощности (на современном языке это называется высокочастотной, или ультрафиолетовой расходимостью). Ошибочность такого результата достаточно очевидна, однако, Рэлей и Джинс не придали этому обстоятельству значения, списав ее, по-видимому, на некоторую неполноту своего рассмотрения.

Одним из первых, кто всерьез принял работы Планка и понял, что квантование энергии является физически значимым, был Альберт Эйнштейн (A. Einstein). В 1905 году выходит его работа ‘Об одной эвристической точке зрения, касающейся превращения и возникновения света’. Слово ‘эвристическая’ в данном контексте означает ‘возможно, нестрогая, но позволяющая быстро получить правильный результат’. Такая осторожная формулировка свидетельствует, что высказываемые Эйнштейном идеи были весьма новы и непривычны для физиков того времени, и имели только ранг одной из в принципе возможных точек зрения. Тем не менее, содержательная часть статьи не оставляет сомнений, что автор рассматривал свою теорию не как математический трюк, а как описание реального положения дел (пусть и, возможно, упрощенное). Терминология и набор понятий, используемых Эйнштейном, значительно ближе к современной физике, чем в статьях Планка – ко времени написания статьи атомарная теория стала общепризнанной.

Эйнштейн, в отличие от Планка, рассуждает о возможности описания *самого света* как системы частиц, которые мы назвали бы фотонами. В начале работы, Эйнштейн указывает на принципиальную разницу между материей и электромагнитным полем, состоящую в том, что, поскольку поле описывается непрерывными в пространстве функциями, число степеней свободы (мод) поля является бесконечным. Он четко формулирует утверждение о том, что бесконечность числа степеней свободы поля и теорема о равномерном распределении приводят к предсказаниям, явно противоречащим эксперименту² (в этом месте, Эйнштейн воспроизводит формулу Рэля-Джинса и отмечает ультрафиолетовую расходимость). После этого, Эйнштейн обращается к формуле Планка. Ее низкочастотная часть совпадает с формулой Рэля-Джинса, и Эйнштейн приходит к естественному выводу, что в этой области известное классическое рассмотрение является правильным. Далее, он пытается найти модель, описывающую высокочастотную асимптотику (то есть, закон Вина $I = \frac{a\omega^3}{e^{b\omega/T}}$). Эйнштейн показывает, что зависимость энтропии такого излучения от объема полости, в которой оно находится, описывается той же формулой, что и энтропия идеального газа частиц. Таким образом, делает он вывод, в пределах применимости закона Вина, излучение *в смысле теории теплоты* ведет себя так, как будто оно

²Одно из таких предсказаний состоит в том, что система из бесконечного числа гармонических осцилляторов должна характеризоваться бесконечной теплоемкостью, поскольку теплоемкость каждого из таких осцилляторов конечна (а именно, равна постоянной Больцмана).

состоит из независимых друг от друга частиц (квантов) с энергией $\hbar\omega$ каждый. Тогда, продолжает Эйнштейн, напрашивается вопрос, не являются ли и законы *возникновения и превращения* света такими, как будто свет состоит из отдельных квантов энергии. С этой точки зрения Эйнштейн описывает свойства трех физических явлений – фотолюминесценции, фотоэффекта, и фотоионизации газов.

Фотолюминесценция – явление свечения определенных веществ под воздействием света от внешнего источника. Задолго до работ Эйнштейна было установлено *правило Стокса* (G. G. Stokes) – частота излучаемого при фотолюминесценции света всегда меньше частоты падающего. Этому факту Эйнштейн дает простое объяснение – фотолюминесценция представляет собой процесс переизлучения кванта света, при котором часть энергии кванта переходит в энергию другого вида (например, тепло). Поэтому энергия излученного кванта всегда меньше энергии падающего.

Наибольшую известность впоследствии получили предсказания, сделанные для фотоэффекта – процесса, при котором электроны вылетают из металлического электрода под воздействием света. Исследования этого явления были предприняты в конце XIX века. Г. Герц (H. R. Hertz) исследовал возникновение электрических разрядов между двумя электродами и обнаружил, что возникновение разряда требует заметно меньшего приложенного напряжения в случае, если на электроды светит солнечный свет. В этих опытах впервые было установлено существование *красной границы* фотоэффекта – эффект исчезал, если солнечный свет был предварительно пропущен через стекло. Поскольку стекло непрозрачно в ультрафиолетовом диапазоне, это означало, что фактически фотоэффект связан с действием на металл ультрафиолетовой части спектра, а более длинноволновое оптическое излучение фотоэффекта не вызывает. В дальнейшем другие исследователи показали, что положение красной границы фотоэффекта не зависит от интенсивности падающего на металл света. Затем, последовали исследования А.Г. Столетова, который установил *пропорциональность интенсивности света и индуцированного им фототока*. С точки зрения классической физики, объяснить эти результаты крайне затруднительно. Действительно, если рассматривать электрон как классическую частицу, находящуюся в некоторой потенциальной яме и покидающую ее под действием электромагнитного поля, следует ожидать, что эффект будет наблюдаться *при любой частоте внешней силы, начиная с некоторого порогового значения величины этой силы*, что противоречит экспериментально наблюдаемой картине.

В рамках квантовой гипотезы, Эйнштейн легко нашел объяснение закону фотоэффекта. Если считать, что вылет фотоэлектрона сопровождается поглощением одного кванта света, очевидно, что энергия кванта должна быть не меньше, чем работа, необходимая для переноса электрона за пределы металла (объяснение существования красной границы). Число выбитых электронов, очевидно, определяется числом поглощенных фотонов, что объясняет закон Столетова. Эйнштейн сделал еще один вывод – энергия фотоэлектрона должна определяться разницей энергии фотона и энергией, определяющей красную границу фотоэффекта. К моменту опубликования работы Эйнштейна, наилучшими были экспериментальные результаты, полученные Ф. Ленардом (P. Lenard), исследовавшим зависимость энергии фотоэлектронов и их количества от частоты и интенсивности падающего света. Впрочем, точность этих результатов оставалась невысокой, что было

связано с несовершенством вакуумной техники, не позволявшей работать с достаточно чистыми металлическими поверхностями. Эйнштейн фактически *предсказал* результаты будущих экспериментальных исследований, и последующее признание работы Эйнштейна происходило по мере проверки его предсказаний.

Наконец, схожие рассуждения были приведены и для задачи об ионизации ультрафиолетовым светом атомов газов. Аналогично проблеме фотоэффекта, ключевым является предстание об ионизации одного атома в результате поглощения одного фотона. Из этого следует существование красной границы фотоионизации (факт, очевидный экспериментаторам того времени) и пропорциональность числа ионизированных атомов интенсивности ультрафиолетового излучения.

Надо сказать, что идеи Эйнштейна не были немедленно приняты научным сообществом. В том числе, в реальное существование фотонов после работ Эйнштейна не поверил М. Планк. Потребовалось еще пять лет, чтобы стала ясна принципиальная неустранимость ультрафиолетовой расходимости формулы Рэлея-Джинса в рамках классической теории. Чтобы подчеркнуть это обстоятельство, Эренфест (P. Ehrenfest) в 1911 году вводит термин ‘ультрафиолетовая катастрофа’. Важность идеи дискретизации энергии и фундаментальный характер введенной Планком постоянной становятся очевидными к концу 1910-х годов. Нобелевскую премию за свои работы по объяснению фотоэффекта А. Эйнштейн получил в 1921 году.

1.4 Шкала масштабов квантовой физики

Видимо, самым важным моментом в задаче об излучении нагретых тел является общность формулы Планка – свойства спектра не связаны с какими-либо особенностями нагретого тела, а определяются единственной его характеристикой – температурой. Более того, из вывода Планка видно, что введенная им постоянная относится не непосредственно к процессу излучения, а описывает свойства распределения энергии по степеням свободы произвольного ансамбля осцилляторов. Результаты Эйнштейна укрепляют в этом убеждении. Это значит, что введенная Планком постоянная является *мировой константой*. Появление новой фундаментальной константы означает, как мы говорили в начале лекции, появление новой области физики, которую впоследствии и назвали квантовой.

Последующее развитие науки показало, что эта область физики совершенно не ограничивается вопросами излучения нагретых тел, но включает в себя фактически все явления, происходящие в микромире – начиная со шкалы масштабов атома. Собственно, поскольку размер атома определяется свойствами самой легкой из частиц, входящих в состав атомы – электрона, сама эта шкала и оказывается задана зарядом e и массой m электрона, а также значением постоянной Планка \hbar . В системе СГС³ значения этих величин равны⁴

³Для простоты запоминания, размерности указаны с использованием *эрга* – размерности СГС для энергии. Чтобы перейти к основным единицам СГС, надо заменить $erg \rightarrow cm^2gs^{-2}$.

⁴Размерность заряда в СГС легко определить из закона Кулона – энергия взаимодействия двух точечных зарядов есть их произведение, деленное на расстояние между

$$e = 4.8 \cdot 10^{-10} \text{erg}^{1/2} \text{cm}^{1/2}$$

$$m = 9.1 \cdot 10^{-28} \text{g}$$

$$\hbar = 1.054 \cdot 10^{-27} \text{erg} \cdot \text{s}$$

Комбинируя различные степени m , e и \hbar , можно получить величины любой заданной размерности. Таким образом, перед нами новая система единиц (ее называют системой единиц Хартри или атомной системой). Система Хартри – это так называемая *естественная система*, масштабы которой, в отличие от привычных СИ или СГС, определяются не теми или иными эталонами, а свойствами элементарных объектов. Приведем для примера атомные масштабы энергии и длины:

$$E_h = \frac{me^4}{\hbar^2} \approx 4.4 \cdot 10^{-11} \text{erg} \approx 27.2 \text{eV}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 5.3 \cdot 10^{-9} \text{cm}$$

Атомная шкала определяет масштабы, характерные для физики электронных оболочек атомов. Разумеется, для других классов задач (например, для описания физики ядра) характерные масштабы оказываются другими.

Обсуждая место квантовой теории в физике в целом, можно поставить вопрос несколько другим образом – как узнать, является ли та или иная система ‘квантовой’ или ‘классической’? ⁵ Общего ответа на этот вопрос нет. Однако, как правило, достаточно сравнить характерную величину действия для исследуемой системы с постоянной Планка. Если действие многократно превышает \hbar – скорее всего, классического описания окажется достаточно.

Разумеется, формулы квантовой теории применимы и для систем с ‘классическим’ характерным действием. В этом случае они должны давать те же предсказания для экспериментально наблюдаемых величин, что и классическое описание. Утверждение о совпадении результатов квантовой и классической теорий в области применимости обоих носит название *принципа соответствия*. С формальной точки зрения, классические формулы должны получаться из квантовых в пределе $\hbar \rightarrow 0$. В качестве небольшого упражнения, предлагаю получить формулу Рэлея-Джинса как классический предел формулы Планка.

Теперь становится понятно, почему квантовая физика не возникла до начала XX века – только к этому времени исследователи добрались до явлений, описание которых существенным образом должно включать атомные масштабы.

ними.

⁵Разумеется, такая намеренно примитивная постановка вопроса не вполне корректна – правильнее спрашивать, насколько существенно квантовые эффекты проявляются в свойствах тех или иных систем.

1.5 Дальнейшая история развития квантовой физики

В начале XX века было получено еще несколько важных результатов, относящихся к эпохе становления квантовой физики. Отложим рассказ о них до следующих лекций и ограничимся кратким пересказом истории позднейших событий. Они связаны, во-первых, с формулировкой и развитием математической формулировки теории - квантовой механики, и, во-вторых, с дискуссией о роли квантовой теории в общей картине физического знания.

Уравнения квантовой механики в современном виде были сформулированы во второй половине 1920-х годов. Почти одновременно было представлено два математически эквивалентных подхода, известных сегодня, по именам создателей, как представление Шредингера (E. Schrödinger, 1926) и представление Гейзенберга (W. Heisenberg, 1925). В рамках данного курса мы ознакомимся только с Шредингеровской трактовкой квантовой механики. Более подробное изучение обоих формулировок предполагается позже, на третьем курсе физфака. Третий подход – фейнмановская формулировка квантовой механики – был сформулирован значительно позже (R. Feynman, 1948). На физическом факультете про него не рассказывают, во всяком случае, в общих курсах, возможно – напрасно. Интересующимся можно порекомендовать книгу Р. Фейнман, А. Хибс “Квантовая механика и интегралы по траекториям”, правда, читать ее стоит не на втором курсе, а несколько позже.

Одновременно с развитием математического аппарата теории не затихала дискуссия о ее физической значимости. Против ‘квантового’ описания мира выступал, прежде всего, Альберт Эйнштейн. Надо сразу сказать, что *правильность* квантовой теории под сомнение поставить практически невозможно – уже в 1930-х годах было ясно, что она корректно описывает огромный объем экспериментальной информации. Вплоть до настоящего времени не обнаружено каких-либо отклонений от предсказаний квантовой теории (разумеется, в пределах ее применимости), причем в некоторых случаях (например, при определении величин магнитных моментов элементарных частиц) согласие результатов вычислений и экспериментальных данных дает рекорды точности. Однако, Эйнштейн считал, что эта теория является ‘не окончательной’, что возможно построить другое описание мира, такое, что квантовомеханические формулы будут следовать из него как частный случай. Неприятие квантовой физики Эйнштейном было связано с тем, что в некоторых случаях ее предсказания результатов измерений носят принципиально вероятностный характер. Знаменита сказанная по этому поводу фраза Эйнштейна ‘Бог не играет в кости’⁶. ‘Окончательная’ теория, которую стремился построить Эйнштейн, должна была быть полностью детерминистической, то есть свободной от вероятностного выбора. Мы коснемся этих вопросов в ходе курса. Сейчас же важно отметить, что невозможность детерминистического описания была в конце концов *установлена экспериментально*, путем проверки так называемых неравенств Белла (J.S. Bell, 1964). По-видимому, эти события следует считать окончательными в истории возникновения квантовой физики.

⁶ Устоявшийся перевод не буквальный, но верно отражает суть слов Эйнштейна.

1.6 Опыты Юнга, Винера и другие свидетельства волновой природы света

Продолжим обсуждение квантов света – фотонов. Это понятие позволяет интерпретировать экспериментальные результаты, свидетельствующие о том, что свет обладает как волновыми, так и корпускулярными свойствами.

Начнем со свидетельств того, что свет представляет собой волну электромагнитного поля. Прямыми доказательствами волновой природы света, полученными еще в начале XIX века, явились наблюдения интерференции и дифракции световых волн. Подробно эти эксперименты рассматриваются в курсе оптики, мы же только кратко опишем их основные результаты.

В опыте Юнга (Th. Young) свет проходил через две параллельных щели в ширме, за которой стоял экран. Если бы свет представлял собой поток малых классических частиц (корпускул), на экране появились бы две полосы, образованные корпускулами, прошедшими через каждую из щелей. Однако, в действительности в опытах Юнга наблюдалась состоящая из многих полос интерференционная картина. Результат опытов Юнга легко интерпретировать в волновой теории, если учесть, что прошедший через щели свет был порожден одним источником и поэтому прошедшие через щели световые колебания являются *когерентными*, то есть имеют согласованную друг с другом фазу. На тех участках экрана, где эта фаза кратна 2π , наблюдалась *конструктивная интерференция* – амплитуды волн складывались. В этих местах наблюдались светлые полосы. На других же участках интерференция была *деструктивной* – волны взаимовычитались, и наблюдались темные полосы. Схожие эксперименты были через несколько лет независимо поставлены Френелем (A.-J. Fresnel).

В поставленных значительно позже (1890) опытах Винера (O. Wiener) было показано, что отраженный зеркалом свет образует *стоячую волну*. В стоячей волне участки конструктивной и деструктивной интерференции чередуются при движении вдоль хода светового луча (а не поперек, как это было у Юнга и Френеля). Основная экспериментальная трудность состояла в том, что период чередования этих участков составляет доли длины волны света, то есть оказывается меньше микрона. Винер решил проблему, расположив тонкую фотопластинку под очень малым углом к плоскости зеркала – при этом период темных и светлых полос, появившихся на пластинке после проявления, оказался равен периоду стоячей волны, деленному на (малую) величину синуса угла наклона пластинки, и Винер смог увидеть чередующиеся полосы в микроскоп.

Вообще говоря, во времена Винера убеждать кого бы то ни было в волновой природе света не требовалось. Однако, важным для нас результатом его опытов являлось доказательство того факта, что потемнение фотоэмульсии связано с волновыми свойствами света – локальной величиной электрического поля электромагнитной волны. С другой стороны, фотохимические процессы характеризуются наличием красной границы, что, вспоминая работу Эйнштейна, следует связать с квантовыми эффектами. Таким образом, в данном случае свет проявляет одновременно и корпускулярные, и волновые свойства (разумеется, сам Винер ни о чем подобном не думал и интерпретировал свои опыты в чисто волновой парадигме).

1.7 Эффект Комптона

По мере становления квантовой физики становилось ясно, что наряду с волновыми, свет обладает также корпускулярными свойствами (вспомните теорию фотоэффекта и формулу Планка). Прямое экспериментальное доказательство того, что электромагнитное излучение может вести себя как поток частиц, обладающих определенными энергией и импульсом каждая, было получено Комптоном (A. Compton) в 1923 году. Комpton исследовал рассеяние рентгеновских лучей электронами вещества. Рентгеновские лучи представляют собой электромагнитные колебания, частота которых на несколько порядков превышает частоту световых волн видимого диапазона.

Комpton показал, что при взаимодействии с электроном частота рентгеновского излучения существенным образом меняется в сторону уменьшения. С точки зрения волновой теории этот эффект представляется необъяснимым – изменение длины волны электромагнитного излучения при рассеянии на электроне в классической физике может быть связано только с доплеровским сдвигом из-за движения этого электрона, однако оценки величины доплеровского сдвига в экспериментах Комптона на много порядков не дотягивают до экспериментально наблюдавшихся величин.

С точки зрения же квантового описания свойств рентгеновских лучей ситуация выглядит абсолютно логично: при рассеянии часть импульса $\hbar\omega/c$ и энергии $\hbar\omega$ фотона передается электрону, и в силу законов сохранения энергии (а, следовательно, и частота) фотона уменьшается. Знания законов сохранения энергии и импульса достаточно, чтобы получить зависимость длины волны рассеянного фотона λ' от угла рассеяния α . Обозначим символами ω, ω' частоту фотона до и после рассеяния, \mathbf{p}, \mathbf{p}' – его импульс, а символом p_e – импульс электрона после рассеяния (начальный импульс электрона равен нулю). Запишем закон сохранения импульса в виде $\mathbf{p} - \mathbf{p}' = \mathbf{p}_e$. Возводя обе части в квадрат, получаем

$$p_e^2 = p'^2 + p^2 - 2p'p \cos \Theta, \quad (1.3)$$

где Θ – угол между векторами \mathbf{p}, \mathbf{p}' , то есть угол, на который фотон отклонился от исходного направления распространения; здесь и далее вектора в формулах обозначены жирным шрифтом, а их абсолютные величины – обычным курсивом.

Поскольку, как было сказано, частота рентгеновского излучения значительно больше атомных частот, характерные энергии рентгеновских квантов (а значит, и электронов после рассеяния) значительно превышают атомный масштаб. Скорость электрона после рассеяния оказывается настолько велика, что необходимо учитывать релятивистские эффекты. Энергия электрона в релятивистской механике равна $E_e = \sqrt{(mc^2)^2 + (p_e c)^2}$. Энергия же фотонов $\hbar\omega$ любой частоты связана с импульсом фотона линейным соотношением⁷ $\hbar\omega = pc$. Закон сохранения энергии:

$$pc - p'c = \sqrt{(mc^2)^2 + (p_e c)^2} - mc^2. \quad (1.4)$$

Возведем эту формулу в квадрат, избавимся от импульса электрона посредством формулы (1.3), и заменим $pc = \hbar\omega = \hbar 2\pi c/\lambda$, $p'c = \hbar\omega' = \hbar 2\pi c/\lambda'$ (где

⁷Эту формулу легко получить как частный случай релятивистского выражения для энергии, приняв во внимание, что масса покоя фотона равна нулю

λ, λ' – длина волны фотона до и после рассеяния). Несложные преобразования приводят к итоговой формуле

$$\lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos \Theta) \quad (1.5)$$

Полученная формула полностью соответствует экспериментальным наблюдениям. Комбинация фундаментальных констант $\frac{2\pi\hbar}{mc}$ носит название *комптоновской длины волны*.

1.8 Волновые пакеты

Перед тем, как пытаться понять, что такое фотон, сто́ит немного обсудить свойства света в классической теории. Свет в вакууме есть электромагнитная волна, распространяющаяся со скоростью c , то есть частота ω и волновой вектор k такой волны связаны законом дисперсии $\omega(k) = ck$. Монохроматическая волна⁸ $E(r) = Ee^{i(kr - \omega(k)t)}$ – бесконечно протяженный в пространстве объект, и на первый взгляд совершенно непонятно, каким образом в квантовой физике она может проявлять свойства частицы – объекта, хорошо локализованного в пространстве. Но эта проблема, на самом деле, несущественная. В классической физике свет тоже можно локализовать в пространстве, введя в рассмотрение *суперпозицию* множества монохроматических волн с различными волновыми векторами.

Выясним, что означает термин ‘суперпозиция’ с точки зрения математики. Если бы волновой вектор принимал значения из какого-либо дискретного множества $\{k_n\}$, следовало бы записать сумму $E(r) = \sum_n E(k_n)e^{i(k_n r - \omega(k_n)t)}$, где комплексные величины $E(k_n)$ определяют, с каким весом и с какими фазовыми множителями разные волны дают вклад в общее значение поля. Величины $E(k_n)$ можно взять какими угодно – любая совокупность $\{E(k_n)\}$ соответствует физически допустимой конфигурации электромагнитного поля. Как вы узнаете из курса электродинамики, это утверждение, являющееся одной из формулировок *принципа суперпозиции*, вытекает из линейности описывающих электромагнитные волны уравнений Максвелла.

Для света в свободном пространстве волновой вектор меняется непрерывным образом, поэтому в записанных выше выражениях сумму следует заменить интегралом. По несущественным для нас сейчас причинам в таких формулах с интегрированием принято писать множитель $(2\pi)^{-D}$, где D – размерность пространства. Таким образом, в трехмерном случае произвольная суперпозиция плоских волн описывается формулой⁹.

$$E(r) = (2\pi)^{-3} \int E(k)e^{i(kr - \omega(k)t)} d^3k, \quad (1.6)$$

а в одномерном – выражением

$$E(r) = (2\pi)^{-1} \int E(k)e^{i(kr - \omega(k)t)} dk. \quad (1.7)$$

⁸В этой и последующих лекциях мы будем писать комплексные выражения, подразумевая, что от для вычисления фактической величины поля следует взять их действительную часть. Это стандартный прием, сильно упрощающий запись.

⁹Для математически подкованных слушателей заметим, что речь идет, разумеется, просто о Фурье-преобразовании из k в r пространство.

Далее для простоты мы ограничимся рассмотрением одномерной системы. Как уже было сказано, любой вид функции $E(k)$ является физически допустимым. Рассмотрим $E(k)$, имеющую вид гауссова пика, умноженного на осциллирующую функцию: $E(k) = E e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2(\Delta k)^2} - ikr_0}$. Величины Δk и k_0 определяют ширину и положение гауссова пика в пространстве волновых чисел, величина r_0 – частоту осцилляций. Подставим это выражение в формулу (1.7) и выполним интегрирование. Рассмотрим сначала нулевой момент времени, $t = 0$. В результате вычисления интеграла получается

$$E(r) \propto E e^{ik_0(r-r_0) - \frac{(\Delta k)^2 (r-r_0)^2}{2}}. \quad (1.8)$$

Давайте обсудим, что у нас получилось. Если величина Δk достаточно мала, поле вблизи точки r_0 напоминает монохроматическую волну с волновым вектором k_0 . Однако, при удалении от этой точки на расстояние, много большее $1/\Delta k$ экспонента быстро спадает, то есть поле падает почти до нуля. Оказывается, что в рассмотренном нами случае поле локализовано в пространстве – в области размером порядка $\Delta R = 1/\Delta k$ вблизи точки r_0 ! Рассмотрим далее, как эта картина будет меняться с течением времени. Вновь выписывая формулы, несложно увидеть, что вывод для t , не равного нулю, отличается от проделанного выше только заменой $r_0 \rightarrow r_0 - ct$.

Мы видим, что с течением времени форма пика сохраняется, меняется только положение точки, около которой поле локализовано. О таком распространяющемся импульсе говорят как о *волновом пакете*. Скорость распространения оптического волнового пакета в вакууме ожидаемо оказалась равна скорости света.

1.9 Соотношения неопределенностей

Итак, гауссов волновой пакет локализован в пространстве с точностью $\Delta R = 1/\Delta k$, где Δk – ширина гауссова пика в пространстве волновых чисел. Иными словами, для того, чтобы достичь лучшей пространственной локализации волнового пакета, его необходимо сделать более ‘размазанным’ по волновым числам. И наоборот, если мы хотим собрать пакет из узкой спектральной полосы (то есть, использовать маленькую Δk), приходится жертвовать его пространственной локализацией. Принято говорить о *неопределенности* координаты и волнового вектора. Для гауссова пакета произведение этих неопределенностей равно 1.

Нетрудно понять, что для пакетов с негауссовой формой огибающей значение $\Delta R \Delta k$ отличается от единицы. Например, можно составить пакет из двух одинаковых по форме, но находящихся в разных точках пространства гауссовых импульсов. У такого образования неопределенность волнового вектора совпадает с Δk для каждого из импульсов, а вот неопределенность координаты определяется расстоянием между ними и может быть сколь угодно большой. Можно показать, что гауссова форма пакета достает минимум произведению $\Delta R \Delta k$, то есть для пакета произвольной формы

$$\Delta R \Delta k \geq 1. \quad (1.9)$$

Это неравенство представляет собой одно из *соотношений неопределенностей* для волновых пакетов. Другое из соотношений неопределенности мож-

но получить, попросту умножив и разделив левую часть (1.9) на величину скорости света. Величина $\Delta t = \Delta R/c$ есть характерное время, за которое пакет пролетает через заданную точку, то есть фактически неопределенность времени его ‘прибытия’ в эту точку. Величина же $\Delta\omega = c\Delta k$ – это, очевидно, неопределенность частоты волнового пакета. Мы получаем

$$\Delta t \Delta\omega \geq 1. \quad (1.10)$$

Мы установили соотношения неопределенностей для одномерной системы. В трехмерном случае формулы получаются такими же, только соотношение (1.9) относится к каждой из трех проекций по-отдельности: $\Delta x \Delta k_x \geq 1$, $\Delta y \Delta k_y \geq 1$, $\Delta z \Delta k_z \geq 1$.

1.10 Соотношения неопределенностей для фотонов

Теперь мы готовы к тому, чтобы ввести в рассмотрение фотоны. Следуя Эйнштейну, будем понимать фотон как волновой пакет, энергия которого равна $\hbar\omega$. Конечно, не следует думать, что такое представление о фотонах хоть в какой-то мере является их строгим определением. Однако, его достаточно для того, чтобы порассуждать о физической природе фотонов, да и об особенностях квантовой физики вообще.

Прежде всего, у энергии фотона $E = \hbar\omega$, очевидно, имеется неопределенность, вытекающая из наличия неопределенности частоты волнового пакета.

$$\Delta t \Delta E \geq \hbar. \quad (1.11)$$

Есть квантовый аналог и у соотношения неопределенностей ‘координата-волновое число’. Из курса электродинамики вы узнаете, что импульс световой волны равен ее энергии, деленной на скорость света. Поэтому неопределенность импульса $\Delta p = \Delta E/c$. Вспоминая также формулу $\Delta t = \Delta R/c$, которую мы использовали при выводе (1.10), заключаем

$$\Delta R \Delta p \geq \hbar. \quad (1.12)$$

Как мы узнаем в ходе следующих лекций, соотношения неопределенностей (1.11, 1.12) в квантовой теории относятся не только к фотонам, но и к другим объектам, в частности, к элементарным частицам с ненулевой массой покоя. Наличие соотношений неопределенностей – одно из принципиальных отличий квантовой физики от классической.

Излишне напоминать, что фигурирующие в уравнениях классической механики значения координаты и импульса частицы представляют собой действительные числа, которые формально можно задать одновременно с произвольной точностью.

1.11 Закон Вина

Представление о фотонах как о волновых пакетах, несущих определенную порцию энергии, позволяет ‘примирить’ результаты экспериментов, свидетельствующих о наличии у света волновых и корпускулярных свойств. В

частности, результаты экспериментов Юнга и Винера можно объяснить, если принять, что вероятность зарегистрировать фотон в данной точке пропорциональна интенсивности света в этой точке (такое описание иногда называют корпускулярной интерпретацией соответствующих опытов). Представление о квантовании энергии при поглощении света позволяет объяснить наличие красной границы фотоэффекта и родственные явления.

Рассмотрим, наконец, более подробно объяснение формулы Планка. Наш вывод будет основан на соотношении неопределенностей. Точные выражения нам получить пока не удастся, но основные черты формул установить мы сможем.

Исходным является следующее рассуждение. Раз уж координата и импульс фотона в точности не известны, мы, очевидно, не всегда сможем различить два фотона – необходимо, чтобы либо их координаты различались больше, чем на ΔR , либо импульсы – больше, чем на Δp .

Рассмотрим некоторый объем V , который мы будем ‘населять’ фотонами. Для заданного значения импульса, в этом объеме помещается порядка $V(\Delta R)^{-3}$ различных по координате фотонов. Давайте определим теперь, сколько фотонов могут иметь заданную частоту, точнее, частоту, находящуюся в небольшом интервале $[\omega, \omega + \Delta\omega]$. Поскольку $\omega = c|p|/\hbar$, модуль импульса фотона должен лежать в интервале $\hbar\omega/c, \hbar(\omega + \Delta\omega)/c$. Удовлетворяющая этому условию область в пространстве импульсов, очевидно – шаровой слой площадью $4\pi(\hbar\omega/c)^2$ и толщиной $\hbar\Delta\omega/c$. В этой области помещается примерно $(4\pi\hbar^3(\omega/c)^2)(\Delta\omega/c)(\Delta p)^{-3}$ различных значений импульса. Перемножая эту величину на число фотонов, различных по координате при заданном значении импульса, получаем искомое число различных фотонов с энергией, лежащей в заданном интервале: $\frac{4\pi\omega^2\Delta\omega}{c^3}V$ (мы учли, что $\Delta R\Delta p \approx \hbar$)¹⁰. Важно отметить, что в конечную формулу не вошли величины $\Delta R, \Delta p$. Это очень хорошо, потому что в противном случае мы оказались бы в затруднении – величин неопределенностей мы не знаем.

Следует обсудить точность полученного выражения. Разумеется, сделанные оценки не позволяют уверенно говорить о величине численного коэффициента – невозможно сказать, на каком точно расстоянии два фотона становятся неразличимыми, можно только утверждать, что оно порядка ΔR . Однако, *характер зависимости* ответа от параметров задачи мы должны были получить правильно. Чтобы отразить это обстоятельство, далее будем писать формулы без численного коэффициента (который мы все равно не знаем), а вместо него будем ставить символ \sim .

Мы определили, какое общее количество различных фотонов в заданном частотном интервале *может присутствовать* в системе. Теперь надо понять, *сколько их есть в действительности* при заданной температуре. Появление нового фотона увеличивает энергию системы на величину $\hbar\omega$. Из статистической физики известно, что вероятность встретить систему в том или ином состоянии пропорциональна $e^{-E/kT}$, где E – энергия этого состояния, kT – произведение постоянной Больцмана на температуру. Значит, вероятность наличия фотона с заданными импульсом и координатой в $e^{-\hbar\omega/kT}$ раз меньше, чем вероятность его отсутствия. Поскольку мы рассматриваем высокочастотную асимптотику, $e^{-\hbar\omega/kT} \ll 1$, то есть вероятность встретить фотон с заданными импульсом и координатой мала. По

¹⁰Получившаяся величина – не что иное, как *плотность состояний* фотонных мод.

этой причине мы вовсе пренебрегаем вероятностью встретить в одном состоянии сразу несколько фотонов. С этими оговорками, получаем оценку общего количества фотонов, присутствующих в заданном частотном интервале: $\sim \frac{\omega^2 \Delta\omega}{c^3} e^{-\hbar\omega/kT} V$.

Осталось перейти от общего количества фотонов в полости к потоку энергии, излучаемых единицей площади поверхности нагретого тела. Рассмотрим полость с нагретыми стенками. Ясно, что все фотоны в слое вблизи стенки, летящие от нее, испущены этой стенкой. Число этих фотонов в слое толщиной l около стенки площадью S , составляет $\sim \frac{\omega^2 \Delta\omega}{c^3} e^{-\hbar\omega/kT} S$. Они испущены за время l/c (мы не интересуемся численным коэффициентом, поэтому для простоты можно думать, что все фотоны вылетают под нормалью к стенке). Таким образом, в единицу времени единица площади стенки испускает $\sim \frac{\omega^2 \Delta\omega}{c^2} e^{-\hbar\omega/kT} l S$ фотонов, с энергией $\hbar\omega$ каждый. Поток энергии от единицы площади на единичный спектральный интервал оказывается равен $\sim \frac{\hbar\omega^3}{c^2} e^{-\hbar\omega/kT} S$, в соответствии с законом Вина.

1.12 Вероятность в квантовой теории

Представление о дискретном характере излучения и поглощения света позволяет обсудить важнейшие вопросы, касающиеся *вероятностного характера* предсказаний квантовой теории.

Рассмотрим мысленно эксперимент, в котором луч света отражается от полупрозрачного зеркала, после которого стоят два фотодетектора – один регистрирует фотоны, прошедшие сквозь зеркало, другой – отраженные от него. Надо сказать, что используемые в современных оптических экспериментах детекторы – *фотоумножители* – основаны на регистрации электронов, выбиваемых из металла при фотоэффекте, поэтому, в соответствии с теорией фотоэффекта, эти детекторы регистрируют *именно отдельные фотоны*.

Для простоты будем думать, что на зеркало падает ровно один фотон (в реальном эксперименте достаточно использовать луч достаточно малой интенсивности, чтобы фотоны в нем можно было считать редкими), и что детектор всегда срабатывает, если на него попал фотон (в реальности вероятность срабатывания детектора, называемая *квантовым выходом*, всегда меньше 1, но мы пока не будем задумываться об этой практической трудности).

Вероятно, каждый сразу согласится, что сработать в нашем эксперименте может *только один* из детекторов – одновременное срабатывание обоих означало бы, что поданный на вход установки фотон превратился в два, что противоречит закону сохранения энергии. Если повторять эксперимент многократно, иногда срабатывать будет один детектор, а иногда – второй (зеркало ведь полупрозрачное!) Значит, в нашем эксперименте фотон проходит сквозь зеркало с *определенной вероятностью*. Сразу возникает множество вопросов.

Прежде всего, можно ли, используя какую-нибудь дополнительную информацию о фотоне или о зеркале, *навверняка* узнать, какой именно из детекторов сработает в данном эксперименте? Такое предположение называется *гипотезой скрытых параметров*. Сторонником именно этой точки

зрения выступал Эйнштейн, говоря, что ‘Бог не играет в кости’. Повторяясь, укажем, что эта точка зрения неверна – результаты измерения свойств квантовых систем во многих случаях, в частности, в рассматриваемом нами эксперименте, носят *принципиально вероятностный характер*. Выбор того или иного исхода эксперимента происходит случайным образом.

Следующий важный вопрос состоит в том, *в какой момент* происходит этот выбор? Первый приходящий в голову ответ – непосредственно в момент рассеяния фотона на зеркале – оказывается неправильным. Чтобы пояснить, почему, рассмотрим опыт, в котором луч света малой интенсивности направляют на полупрозрачное зеркало, а затем, сводя при помощи других зеркал отраженный и прошедший зеркало луч, наблюдают интерференционную картину. Из эксперимента известно, что интерференционная картина в таких системах наблюдается всегда, и ее вид не зависит от интенсивности входного луча. Если бы выбор траектории каждого из фотонов в отдельности происходил в момент рассеяния на полупрозрачном зеркале, дифракционной картины не наблюдалось бы – каждый из фотонов приходил бы на экран по одной из возможных траекторий, и не имел бы никакой информации о существовании второй – а параметры дифракционной картины определяются свойствами *двух траекторий в совокупности*. Два же различных фотона интерферировать друг с другом не могут, поскольку они отделены друг от друга большим интервалом времени (тем большим, чем меньше интенсивность входного луча)¹¹.

Приходится сделать вывод, что выбор одного из вероятных исходов измерения происходит в момент срабатывания фотодетекторов, то есть *в момент измерения*. Это утверждение является центральным в *Копенгагенской интерпретации квантовой теории*, являющейся на сегодняшний день общепринятой (хотя и не единственной).

Утверждение о выборе одного из исходов в момент измерения влечет весьма сильные последствия. Оно говорит, что момент начала эксперимента и момента выбора может отделять сколь угодно большой промежуток времени, в течение которого может произойти множество событий, занимающих сколь угодно большую пространственную область. На этом построены ряд парадоксов, наиболее известными из которых являются парадокс с котом Шредингера и так называемый парадокс Эйнштейна-Подольского-Розена (ЭПР). Эти парадоксы мы обязательно обсудим в конце курса.

¹¹В этом рассуждении мы предполагали отсутствие (или малость) *корреляций* фотонов.

Дополнительный материал и задачи для семинарских занятий

1.А Формула Планка. Законы фотоэффекта

Задачи.

1. Найти положение максимума спектра излучения черного тела.

Решение. Дифференцируя формулу Планка по частоте и приравнявая ее нулю, получаем трансцендентное уравнение $(3-x)e^x = 3$, $x = \hbar\omega/kT$. Его решение $\omega_{\max} \approx 2.82kT/\hbar$. Легко видеть, что 2-й закон Вина дает близкое значение максимума спектра излучения твердого тела $\omega_{\max} = 3kT/\hbar$.

2. Записать формулу Планка как функцию длины волны.

Решение. Учтывая, что $E_{\omega}d\omega = E_{\lambda}d\lambda$, получаем $E_{\lambda} = E_{\omega}(\lambda)\frac{d\omega}{d\lambda} = \frac{4\pi^2\hbar c^2}{\lambda^5(\exp(2\pi\hbar c/\lambda kT)-1)}$.

3. Найти длину волны, соответствующую максимуму спектра солнечного излучения.

4. Определить скорость электрона, выбитого с поверхности алюминиевого катода (работа выхода $E_{out} = 3.74$ эВ) квантом света ближнего УФ-диапазона ($\lambda = 300$ нм).

1.В Размерности. Атомная система единиц.

В классической макроскопической физике масштабы задачи (т.е. характерные параметры той или иной размерности) могут быть весьма различны. Поэтому нет никаких оснований привязывать систему единиц к каким-то характерным масштабам - вместо этого используются исторически возникшие системы единиц СИ и СГС. Отметим, что в теоретической физике принято использовать систему СГС, которая не требует введения четвертой базовой размерности для рассмотрения электрических эффектов. Вместо этого размерности электрических величин выражаются через механические. Например, из закона Кулона $F = q_1q_2/r^2$ получаем размерность заряда в системе СГС $[q] = M^{1/2} L^{3/2} T^{-1}$.

Однако на уровне микромира масштабы в большинстве задач представляют собой комбинации нескольких фундаментальных констант. Поэтому для описания явлений микромира удобно ввести т.н. атомную систему единиц (систему Хартри), все характерные масштабы в которой выражаются через комбинации трех фундаментальных констант - постоянной Планка, заряда и массы электрона. Например, атомный масштаб длины $a_0 = \hbar^2/me^2 \approx 5.29 \cdot 10^{-9}$ см, как мы в дальнейшем увидим, действительно соответствует радиусу орбиты электрона в атоме водорода. Аналогично, атомный масштаб скорости $V_a = e^2/\hbar \approx 2.19 \cdot 10^8$ см/с дает оценку величины скоростей электронов в атоме, а атомный масштаб энергии - порядок величины работы выхода.

Если нас интересует не только движение электрона в атоме, но и его взаимодействие с электромагнитной волной - то у нас в задаче появляется

два масштаба скорости - атомный масштаб и скорость света. Их отношение $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ называется постоянной тонкой структуры. Это безразмерный параметр, который позволяет ввести иерархию масштабов. Например, новый масштаб длины $\alpha^{-1}a_0$ дает нам длину волны, излучаемой электроном, движущимся по орбите с радиусом a_0 .

Задачи.

1. Найти размерности напряжения и сопротивления в системе СГС.
2. Оценить характерные масштабы силы и частоты в атомной системе единиц.
3. В рамках классической модели оценить мощность излучения электрона, движущегося по орбите атома водорода.

Решение. Мощность излучения ускоренно движущегося заряда должна зависеть от величины этого заряда и его ускорения. Причем от их знака она зависеть не должна - поэтому в формулу для мощности излучения должны входить четные степени величины заряда и его ускорения. Центроостремительное ускорение электрона на орбите атома водорода определяется атомными масштабами длины и частоты $\ddot{x} \sim \omega_a^2 a_0$. Собирая из квадрата ускорения, квадрата заряда и скорости света величину размерности мощности, получаем $P \sim e^2 \ddot{x}^2 / c^3 = e^2 \omega_a^4 a_0^2 / c^3 = \alpha^3 \omega_a E_a \approx 0.7$ эрг/с.

4. В рамках классической модели оценить время излучения атомом водорода фотона на атомной частоте.

Решение. Используя результат предыдущей задачи, находим $\tau \sim \hbar \omega_a / P \approx 0.4$ нс.

1.С Интеграл Фурье.

Ранее мы записали немонахроматическое электромагнитное поле в виде волнового пакета, который с математической точки зрения является т.н. интегралом Фурье. Из школьного курса алгебры известно, что периодическую функцию можно разложить в ряд Фурье, и коэффициенты разложения содержат полную информацию об этой функции. Непериодическую функцию можно представить как периодическую, период которой стремится к бесконечности. Наименьшая частота при этом будет стремиться к нулю - т.е. в ряд будут входить все возможные частоты, поэтому ряд превратится в интеграл. Используя комплексную экспоненту, его можно записать в виде

$$f(t) = (2\pi)^{-1} \int f(\omega) e^{i\omega t} d\omega,$$

где комплексная амплитуда $f(\omega)$ играет роль коэффициентов разложения. Ее можно найти обратным преобразованием¹²

$$f(\omega) = \int f(t) e^{-i\omega t} dt.$$

Пусть источник испускает квазигармоническую волну $E(t) = E_0(t) e^{i\omega_0 t}$, которую с помощью интеграла Фурье можно представить как суперпозицию

¹²Вид преобразования Фурье, используемый в различных книгах, может немного различаться. Мы поставили коэффициент $(2\pi)^{-1}$ перед прямым произведением Фурье, однако вариант, в котором коэффициент $(2\pi)^{-1/2}$ ставят и перед прямым, и перед обратным преобразованиями Фурье, также распространен.

волн с различными частотами

$$E(t) \sim \int E_0(\omega) e^{i(\omega_0 + \omega)t} d\omega.$$

Каждая частотная компонента распространяется со своей скоростью $V(\omega) = c/n(\omega)$. Как известно, дисперсию света в веществе, т.е. зависимость скорости распространения волны или ее волнового вектора $k(\omega) = \omega n(\omega)/c$ от частоты обнаружил еще Ньютон. Поэтому распространение волнового пакета описывается формулой

$$E(t, x) \sim \int E_0(\omega) e^{i(\omega_0 + \omega)t - ik(\omega_0 + \omega)x} d\omega.$$

Закон дисперсии можно разложить в ряд около ω_0 :

$$k(\omega_0 + \omega) = k(\omega_0) + \left. \frac{dk}{d\omega} \right|_{\omega_0} \omega + \dots$$

Тогда

$$E(t, x) \sim e^{i\omega_0 \left(t - \frac{k(\omega_0)x}{\omega_0} \right)} \int_{-\infty}^{\infty} E_0(\omega) e^{i\omega \left(t - \left. \frac{dk}{d\omega} \right|_{\omega_0} x \right) + \dots} d\omega \approx E_0 \left(t - \frac{x}{V_g} \right) e^{i\omega_0 \left(t - \frac{x}{V_{ph}} \right)},$$

$V_{ph} = \omega/k$ - фазовая скорость, $V_g = d\omega/dk$ - групповая скорость. Эти скорости могут довольно сильно различаться. Если учесть высшие производные закона дисперсии, можно получить расплывание волнового пакета.

1.D Когерентность

В большинстве случаев свет - результат излучения большого числа атомов. Если речь идет о звезде или лампе накаливания, то даже если атомы излучают на одной и той же частоте - они никак не связаны друг с другом, поэтому излучаемые ими волны имеют случайные начальные фазы. Это приводит к тому, что фаза излученного таким источником света флуктуирует. Можно показать, что характерное время, за которое фаза световой волны случайным образом меняется, обратно пропорционально его ширине спектра. Ширина спектра излучения абсолютно черного тела по формуле Планка по порядку величины равна его средней частоте - поэтому фаза света звезды или лампы накаливания сбивается буквально на расстоянии нескольких длин волны.

Две волны с одной частотой называют когерентными, если их разность фаз не меняется со временем. Только такие волны могут интерферировать друг с другом. Максимальное расстояние вдоль луча света, на котором его фаза не успевает случайно измениться, называют длиной когерентности. Как мы только что выше показали, длина когерентности света звезды по порядку величины равна длине волны. Значительно большую длину когерентности имеет лазерное излучение - за счет того, что в лазере все атомы излучают не независимо.

Для измерения длины когерентности светового луча используют интерферометр Майкельсона-Морли: луч света разделяется на два при помощи полупрозрачного зеркала. Каждый луч идет по своему пути, отражается от своего зеркала и снова возвращается назад. Оба луча снова соединяются на том же полупрозрачном зеркале - но от разницы путей до двух зеркал зависит, сложатся эти два луча в фазе или в противофазе. Поэтому при медленном смещении одного из зеркал интенсивность света на выходе интерферометра будет осциллировать. Если же разница путей до двух зеркал станет больше длины когерентности - интерференция пропадет, и интенсивность света на выходе перестанет зависеть от положения зеркала. Длина когерентности лазерного излучения может достигать нескольких метров.

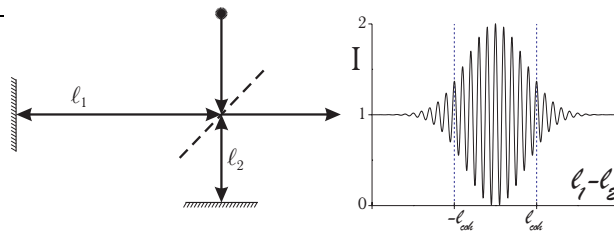


Рис. 1.2: Определение длины когерентности световой волны при помощи интерферометра Майкельсона-Морли.

Аналогичным образом определяют поперечный радиус когерентности - как максимальное расстояние между точками волнового фронта волны, между которыми разность фаз остается постоянной. Для измерения радиуса когерентности используют интерферометр Юнга. При прохождении плоской волны через две тонкие щели на экране за щелями возникает интерференционная картина. Но если расстояние между щелями превышает радиус когерентности - интерференционная картина пропадает.

Область пространства, имеющую размеры длины и радиуса когерентности, называют объемом когерентности. С точки зрения квантовой механики каждый фотон интерферирует сам с собой. Поэтому объем когерентности определяет границы области, в которой локализован отдельный фотон.

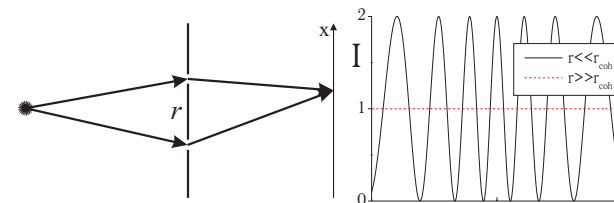


Рис. 1.3: Определение радиуса когерентности световой волны при помощи интерферометра Юнга.

Задачи.

1. Найти период интерференционной картины в опыте Юнга - расстояние между соседними максимумами на экране, находящемся на расстоянии L от двух параллельных тонких щелей, разделенных расстоянием d , на которые падает плоская световая волна.

2. Оценить радиус когерентности солнечного света.

Решение. Рассмотрим два атома (A и B), излучающие световую волну, и две точки волнового фронта (G и F). Электромагнитное поле в каждой из этих точек является суперпозицией полей, испущенных двумя атомами. Разность фаз, с которой складываются поля двух атомов в каждой из этих двух точек, определяются разностью путей от этой точки до каждого из атомов: $\Delta\varphi_G = 2\pi(AG - BG)/\lambda$, $\Delta\varphi_F = 2\pi(AF - BF)/\lambda$. До

тех пор, пока эти разности фаз будут различаться меньше, чем на π - поля в этих двух точках будут флуктуировать синхронно. Таким образом, условие когерентности света в этих двух точках $\Delta\varphi_G - \Delta\varphi_F \leq \lambda/2$. Чем больше расстояние между атомами А и В - тем быстрее это условие будет нарушено. Если оба атома находятся на Солнце, то максимальное расстояние между атомами - это диаметр Солнца $D = 1.4 * 10^9$ м. Отсюда находим радиус когерентности - расстояние между

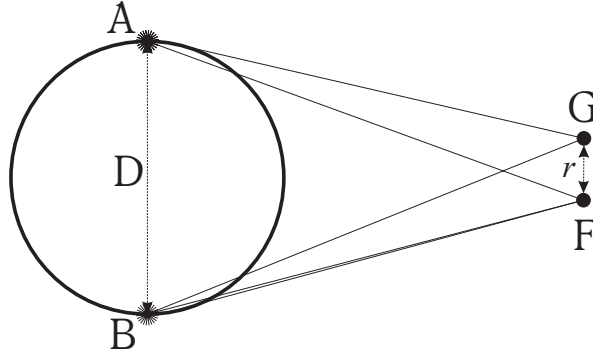


Рис. 1.4: К оценке радиуса когерентности солнечного света.

точками GF, при котором нарушается условие когерентности $r_c \sim \lambda L/D$, где $L = 150 * 10^9 = 1$ астр.ед.- расстояние от Солнца до Земли. Таким образом, радиус когерентности солнечного света $r_c \sim 100\lambda$. Учитывая, что длина когерентности солнечного света $l_c \sim \lambda$, объем когерентности света Солнца имеет форму блина.

3. Оценить среднее число фотонов солнечного излучения в объеме когерентности, если солнечная постоянная (интенсивность излучения Солнца на орбите Земли) $I_S = 1.4 * 10^6$ эрг/см²с.

Решение: $N \sim \frac{I_S l_c r_c^2}{c \hbar \omega} \approx I_S \frac{10^4 \lambda^4}{\hbar c^2} \approx 0.02$.

4. Оценить давление солнечного света на поверхности Земли.

5. Оценить количество фотонов в объеме когерентности для лазерной указки (считать, что длина когерентности $l = 30$ см, а радиус когерентности совпадает с шириной пучка).

Соотношение неопределенностей. Иерархия масштабов длины.

1. Используя соотношение неопределенностей, оценить размер атома водорода.

Решение: энергия атома $E = -e^2/r + p^2/2m$. Если $\Delta p \sim \hbar/r$, то минимуму энергии соответствует $r = a_0 = \hbar^2/me^2$.

2. Найти длину световой волны, излучаемой электроном, вращающимся вокруг протона по орбите с радиусом a_0 .

Решение: находя частоту вращения электрона вокруг протона, получаем $\lambda = c/\omega_a = \alpha^{-1} a_0 \approx 7.3 * 10^{-7}$ см.

3. Используя соотношение неопределенностей, оценить минимальный размер области, в которой может быть локализован один электрон.

Решение. Кинетическая энергия электрона не может превышать его удвоенную энергию покоя - это приведет к рождению дополнительной электрон-позитронной пары. Отсюда получаем $(\Delta p)^2/m \sim mc^2$, $\lambda_c \sim \hbar/\Delta p \sim \hbar/mc = \alpha a_0 \approx 3.86 * 10^{-11}$ см.

4. Оценить изменение скорости свободного электрона в результате рассеяния на нем фотона видимого диапазона.

5. Оценить "классический радиус электрона" - радиус шарика, имеющего заряд электрона, собственная кулоновская энергия которого равна массе покоя электрона.

Решение: $r_c = e^2/mc^2 = \alpha^2 a_0 \approx 2.82 * 10^{-13}$ см.

6. Считая волновую функцию частицы вне прямоугольной потенциальной ямы пренебрежимо малой, оценить минимальную глубину такой ямы ширины d , при которой частица может находиться в ней, не выскакивая.

Решение: будем считать, что неопределенность координаты частицы в яме не может быть больше ширины ямы d . Чтобы частица не выскакивала из ямы, ее глубина должна быть не меньше, чем кинетическая энергия частицы $U_{\min} \sim E_k = \hbar^2/2md^2$.

7. С помощью соотношения неопределенностей оценить минимальную энергию гармонического осциллятора.

Решение: Энергия гармонического осциллятора $W = kx^2/2 + p^2/2m$. Учитывая, что из соображений неопределенности $p \geq \hbar/x$, находим его минимальную энергию $W_{\min} \sim \hbar\omega$, $\omega = \sqrt{k/m}$.

8. Представление электромагнитного поля как совокупности гармонических осцилляторов, и учет их минимальной энергии (т.н. "нулевых флуктуация вакуума") позволяет сделать вывод о том, что две параллельные металлические пластины должны притягиваться вследствие давления нулевых флуктуаций. Это явление называется силой Казимира. Оценить давление силы Казимира, действующее на каждую из двух пластин, находящихся на расстоянии a друг от друга, из соображений размерности.

Решение: Кроме расстояния между пластинами в ответ обязана войти скорость света (потому что речь идет об электромагнитных волнах) и постоянная Планка (потому что она входит в минимальную энергию осциллятора). Составляя из этих трех величин комбинацию размерности давления, получаем $p \sim \hbar c/a^4$.

Глава 2

Волновые свойства частиц.
Волновая функция и
уравнение Шредингера.

До этого мы говорили, в основном, о квантовых свойствах света. Напомним, главным свидетельством неклассической природы электромагнитного поля является то обстоятельство, что свет, в зависимости от экспериментальной ситуации, проявляет как волновые, так и корпускулярные свойства. Теперь мы обсудим экспериментальные свидетельства того, что схожим образом ведут себя и материя – частицы, образующие атом (а именно, электроны). Эти эксперименты, в том числе, сыграли решающую роль в формировании современного математического аппарата квантовой теории. К рассмотрению этого аппарата мы затем и перейдем.

2.1 Модель атома Бора

Вернемся к истории развития квантовой физики. Следующий после работ Эйнштейна важный шаг в развитии квантовой физики был сделан Нильсом Бором (N. Bohr), который пришел к выводу, что постоянная Планка описывает физически значимые свойства не только света, но и *материи*. Речь идет о знаменитых постулатах Бора, сформулированных в 1913 году и позволивших описать наблюдаемые свойства атома водорода. Бор уже полностью понимал универсальность постоянной Планка (в его статье она так и называется – ‘универсальная постоянная’), а также важность появления новой шкалы масштабов, которую он подробно обсуждает.

Вплоть до 1911 года в физике господствовала предложенная Томсоном (J.J. Thomson) модель строения атома, трактующая его как некий положительный остов, размер которого и являлся размером самого атома, в который ‘вкраплены’ электроны (часто это модель называли ‘пудинг с изюмом’). Внутренних противоречий в рамках классической физики эта модель не содержала. Однако, в 1911 году модель Томсона была опровергнута Резерфордом (E. Rutherford) на основании экспериментальных данных по рассеянию α -частиц, полученных под его руководством Гейгером (H. Geiger) и Марсденом (E. Marsden) в 1909 году. Пролетая сквозь тонкую золотую фольгу, испускаемые радием α -частицы, как правило, не рассеивались вовсе, но в небольшом проценте случаев рассеивались на довольно большие углы. Это означало, что образец содержит компактные рассеиватели, занимающие небольшую долю его объема. Электроны в качестве таких рассеивателей выступать не могли, поскольку в то время уже было известно, что масса электрона существенно (примерно, на 4 порядка) меньше массы α -частицы – а это означает, что при столкновении с электроном массивная α -частица практически не меняет траекторию движения. Значит, рассеяние происходит на ядрах атомов, и размер этих ядер оказывается значительно меньше размера атома. Этот вывод находился в явном противоречии с моделью Томсона. Количественный анализ углов рассеяния подтвердил картину рассеяния на положительно заряженных ядрах атомов, и позволил установить, что размер ядра не превышает $1/3000$ размера атома. Следовало признать, что электроны должны обращаться вокруг ядра. Но тогда, по законам классической физики, они должны были излучать электромагнитные волны, как любые заряды, движущиеся с ускорением. Вследствие этого, энергия ‘классических’ электронов должна непрерывно теряться, а сами они – падать на ядро! Ничего этого, конечно, в действительности не происходит.

В некоторых случаях атомы действительно удавалось заставить излучать свет - например, поджигая в газе электрический разряд (то есть, говоря современным языком, переводя атомы в возбужденное состояние). Но эти эксперименты только добавляли проблем классической теории – спектры испускаемого атомами света состояли из узких линий, то есть излучение света происходило только на строго определенных частотах. В классической же картине никаких выделенных частот нет – спектр излучения газов должен быть непрерывным.

Рассуждения Бора основывались на следующей логике. Бор считает, что при испускании фотона с частотой ω энергия обращающегося вокруг ядра электрона меняется скачком - на величину $\hbar\omega$. Чему же должна быть равна частота испущенного фотона? Бор предполагает, что она должна быть простым образом связана с классической частотой Ω обращения электрона по орбите, на которой он оказался в результате перехода. Именно, Бор предполагает связь $\omega = \Omega/2$. Для простоты, Бор рассматривает только круговые орбиты. Эти условия накладывают достаточно жесткие ограничения на то, с каким именно периодом электрон может обращаться вокруг ядра – выкладки показывают, что разрешенными оказываются орбиты, угловой момент которых равен целому числу постоянных Планка, $m\omega R^2 = n\hbar$. Теория Бора замечательно воспроизводила закономерности спектра атомов водорода. Наглядное представление о выделенных орбитах (их называют орбиталями), по которым движется электрон, сохранилось до настоящего времени, хотя с точки зрения современной теории оно и является чрезмерно упрощенным.

Наконец, необходимо упомянуть экспериментальные результаты, полученные в 1913 году Г. Мозли (H. Moseley) при исследовании спектра рентгеновского излучения, возникающего при бомбардировке атомов достаточно быстрыми электронами. Это излучение, очевидно, имело ту же природу, что и оптическое излучение атомов, поскольку рентгеновский спектр состоит из узких линий (теперь мы знаем, что его возникновение связано с переходами электронов между внутренними оболочками; его называют *характеристическим*). Мозли провел эксперименты по определению спектра многих элементов и установил, что положение самой интенсивной линии хорошо описывается формулой:

$$\hbar\omega = \frac{3}{4} \frac{me^4}{2\hbar^2} (Z - 1)^2. \quad (2.1)$$

Здесь Z – номер элемента в таблице Менделеева, определяющий, как мы знаем теперь, заряд ядра в атомной системе единиц. Значение открытия Мозли состояло прежде всего в том, что он впервые экспериментально продемонстрировал физическую значимость номера элемента в периодической таблице. Кроме того, стало ясно, что теория Бора имеет отношение не только к атому водорода, но и к атомам остальных элементов¹. Именно

¹Поясним, в чем состоит различие спектра атома водорода и характеристического излучения более тяжелых атомов. Линия характеристического рентгеновского излучения, о которой идет речь, связана с переходами электронов с первой возбужденной Боровской орбитали на основную. Для атома водорода вместо множителя $(Z - 1)^2$ соответствующая формула содержит Z^2 . Как мы знаем теперь, на внутренних орбиталях атомов содержится по 2 электрона. В экспериментах Мозли внешний (быстрый) электрон выбивал один из электронов, находящихся на основной орбитали, после чего его место занимал

работы Мозли привлекли интерес физического сообщества к результатам Резерфорда и Бора.

2.2 Волновые свойства частиц. Гипотеза де Бройля и эксперимент Дэвиссона-Джермера

Важнейший шаг в понимании квантовой природы материи был сделан в 1924 году Луи де Бройлем (L. de Broglie). Он предположил, что, подобно тому, как свет проявляет как волновые, так и корпускулярные свойства, так и частицы материи могут в определенных условиях вести себя как волны. Частота и длина волны этих волн, согласно гипотезе де Бройля, определяется теми же формулами, что и в случае фотонов: $\hbar\omega = E$, $\hbar k = p$, где E и p – соответственно, кинетическая энергия и импульс частицы. К своим выводам де Бройль пришел, пытаясь понять природу боровских орбит электронов в атоме. В предположении о волновом характере движения электрона, правила квантования Бора находили очень простое толкование: движение электрона по заданной орбите возможно, только если на этой орбите укладывается целое число длин волн электрона. Это правило представляется естественным, поскольку для других орбит имеет место деструктивная интерференция волн, пробежавших по орбите разное количество витков, что и означает ‘саморазрушение’ орбиты. Важно, что де Бройль не ограничивался интерпретацией модели Бора, но утверждал, что волновые свойства должны быть характерны для природы электронов в целом.

Свои выводы де Бройль изложил в виде диссертации. Интересно, что члены ученого совета Парижского университета отнеслись к ней весьма критически. Положение спасла положительная реакция Эйнштейна, которому рукопись была направлена на рецензию. В следующем году работа де Бройля была опубликована в виде статьи, а еще через два года нашла блестящее подтверждение в эксперименте Дэвиссона (C. Davisson) и Джермера (L. Germer). В этом эксперименте, пучек электронов был направлен на поверхность монокристалла никеля. Волны де Бройля дифрагировали на решетке никеля, подобно тому, как свет дифрагирует на обычной дифракционной решетке. Чтобы обеспечить выполнение условий дифракции, энергия электронов (около 50 эВ) была выбрана таким образом, чтобы соответствующая длина волны де Бройля оказалась сравнимой с периодом кристаллической решетки никеля (интересно, что характеристики решетки никеля были известны из полностью аналогичных экспериментов по рассеянию рентгеновских лучей). Перемещая детектор электронов, Дэвиссон и Джермер действительно обнаружили дифракционный пик, причем его угловое положение полностью соответствовало ожиданиям.

электрон с первой орбитали (что и сопровождалось испусканием рентгеновского кванта). При этом переходе, второй из электронов основной орбитали остается на ней и *частично экранирует заряд ядра* - эффективно, электрон с первой орбитали движется в поле положительного заряда величины $Z - 1$, а не Z .

2.3 Волновая функция

От гипотезы де Бройля один шаг до понятий современной квантовой теории. Необходимо указать, *какая именно* из величин, характеризующих электрон, проявляет волновые свойства. Необходимое понятие, введенное Шредингером, называется *волновой функцией* электрона. Обозначается эта величина буквой ψ ; в простейшем случае волновая функция электрона представляет собой комплексную величину, зависящую от координат и времени: $\psi(\mathbf{r}, t)$. Необходимо сразу сказать, что волновая функция *не имеет классического аналога*, то есть нельзя привести какую-либо известную в классической физике величину, ‘похожую’ на волновую функцию. Волновую функцию невозможно напрямую измерить, о ней можно только судить по результатам измерений классических величин.

Как и любое комплексное число, волновая функция может быть охарактеризована амплитудой (модулем) и фазой, то есть представлена в виде $|\psi(\mathbf{r}, t)|e^{i\phi(\mathbf{r}, t)}$. Простой физический смысл имеет только первая из этих величин.

Квадрат модуля волновой функции, $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \equiv \psi^(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)$ представляет собой плотность вероятности обнаружить частицу в заданной точке пространства в заданный момент времени.*

Поскольку вероятность обнаружить частицу *хоть где-нибудь*, очевидно, равна единице, волновая функция должна быть *нормирована*: в любой момент времени должно быть выполнено условие

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = 1. \quad (2.2)$$

То обстоятельство, что мы говорим о вероятности найти частицу в той или иной точке, сразу означает, что точное значение координат частицы в квантовой физике определить в общем случае невозможно. Можно говорить только о среднем значении координат $\langle \mathbf{r} \rangle$ – точке в пространстве, определяющей положение частицы *приблизительно*². Эта величина определяется формулой

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}, t)\mathbf{r}\psi(\mathbf{r}, t)d^3r.$$

Эта формула следует из приведенного выше выражения для плотности вероятности. Делокализацию частицы в пространстве характеризует неопределенность координаты $\Delta \mathbf{r}$ – величина, имеющая смысл дисперсии координаты. Квадрат этой величины определяется формулой

$$(\Delta \mathbf{r})^2 = \langle (\mathbf{r} - \langle \mathbf{r} \rangle)^2 \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}, t)(\mathbf{r} - \langle \mathbf{r} \rangle)^2 \psi(\mathbf{r}, t)d^3r.$$

²Чтобы не перегружать изложение, мы не уделяем внимания тому, как формулы ‘устроены’ с точки зрения координатных индексов. Для интересующихся отметим, что величина $\langle \Delta \mathbf{r} \rangle$ представляет собой вектор, а ее квадрат – тензор второго ранга.

Непосредственно значение фазы волновой функции определено быть не может. Более того, эта величина лишена физического смысла – все формулы квантовой теории и ее предсказания для экспериментально наблюдаемых величин остаются неизменными, если домножить волновую функцию на множитель $e^{i\phi_0}$, тем самым поменяв ее фазу³. Физический смысл, однако, имеет *разность фаз* волновой функции в различных точках пространства. В частности, как мы увидим ниже, за возникновение интерференционной картины ответственна именно разность фаз волновой функции.

Знание волновой функции дает возможность определить не только информацию о пространственной локализации квантовой частицы, но и охарактеризовать другие ее свойства, например, импульс. Среднее значение импульса определяется выражением

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \psi(\mathbf{r}, t) d^3r,$$

неопределенность импульса Δp – формулой

$$(\Delta \mathbf{p})^2 = \langle (\mathbf{p} - \langle \mathbf{p} \rangle)^2 \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \langle \mathbf{p} \rangle \right)^2 \psi(\mathbf{r}, t) d^3r.$$

Эти формулы можно понять, продолжая аналогию с волнами электромагнитного поля: для волновой функции в виде плоской волны e^{ikr} импульс должен быть в точности равен $\hbar k$ (то есть, среднее значение импульса должно быть равно $\hbar k$, а его неопределенность – обращаться в нуль).

Несложно усмотреть аналогию с картиной волновых пакетов, о которых мы говорили раньше. Действительно, поскольку волновая функция определена во всех точках пространства, с ее помощью можно описывать такие типично ‘волновые’ явления, как интерференция. Конечно, такое описание требует еще и указать *уравнение*, которому волновая функция подчиняется. Это уравнение должно иметь решения в виде бегущих волн или волновых пакетов, способных интерферировать. Однако, важно отметить *принципиальную возможность* появления в теории волновых свойств частиц. В классической же картине, трактующей частицы как точечные объекты, в заданный момент присутствующие *в определенной точке пространства*, интерференция отсутствует, какими бы уравнениями движение частиц не описывалось.

Как можно убедиться, как и в случае фотонов, для каждой из пространственных координат имеет место соотношение неопределенностей

$$\langle \Delta r_i \rangle \langle \Delta p_i \rangle \geq \hbar. \quad (2.3)$$

2.4 Уравнение Шредингера

Знание волновой функции в заданный момент времени дает полную информацию о состоянии квантовой системы. Для того, чтобы определить, как это состояние меняется с течением времени, надо знать, как меняется с течением времени волновая функция. Зависимость волновой функции

³Обращаем внимание на то, что величина ϕ_0 не должна зависеть от координат, то есть формулы квантовой теории остаются неизменными только при одновременном изменении фазы на одну и ту же величину во всех точках.

от времени определяется *уравнением Шредингера*. Для частицы массы m , движущейся в потенциале⁴ $U(\mathbf{r})$, уравнение Шредингера имеет вид⁵

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.4)$$

Сразу обратим внимание на качественное отличие этого уравнения от уравнений классической механики. Уравнения классической механики – *обыкновенные дифференциальные уравнения*, поскольку классическая механика оперирует с *дискретными переменными*. Уравнение же Шредингера – *уравнение в частных производных*, поскольку волновая функция – *непрерывная функция координат*. Как уже было сказано, это обстоятельство является принципиальным, поскольку дискретные переменные с определенными значениями непригодны для описания волновых свойств частиц.

Убедимся прежде всего, что уравнение Шредингера обеспечивает сохранение нормировки (2.2) во все моменты времени (если нормировка с течением времени нарушалась бы, теория была бы лишена всякого смысла!). Вычислим производную (2.2) по времени и убедимся, что она обращается в нуль (здесь и дальше, для простоты записи, приведены формулы для одномерной системы)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \psi^* \psi dx = \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx + \int \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^* \psi dx \quad (2.5)$$

Производная волновой функции по времени определена уравнением Шредингера. Подставляем:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \psi^* \psi dx = \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi + U(x)\psi \right) dx - \frac{1}{i\hbar} \int \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi + U(x)\psi \right)^* \psi dx. \quad (2.6)$$

Знак ‘минус’ перед вторым слагаемым появился при вычислении комплексного сопряжения от множителя $\frac{1}{i\hbar}$. Нетрудно видеть, что слагаемые, содержащие $U(x)$, сокращаются. Остается показать, что сокращаются также и члены, содержащие вторые производные:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \psi^* \psi dx = \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \left(- \int \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx + \int \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi dx \right). \quad (2.7)$$

Для этого, достаточно выполнить в каждом из них интегрирование по частям, приняв во внимание, что, поскольку частица локализована в конечной области пространства, волновая функция и ее производные на бесконечности должны обращаться в нуль. Однократное интегрирование по частям дает

$$\int \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx = - \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} d\psi = - \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx$$

и точно такое же выражение для второго интеграла. Таким образом, норма сохраняется:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \psi^* \psi dx = 0. \quad (2.8)$$

⁴Уравнение Шредингера сохраняет силу также и для зависящего от времени потенциала $U(\mathbf{r}, t)$, но мы для простоты ограничимся анализом свойств статического случая.

⁵Запись $\frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(\mathbf{r}, t)$ в этом выражении означает сумму вторых производных волновой функции по всем пространственным координатам, то есть $\frac{\partial^2}{\partial r^2} \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Уравнение Шредингера – такой же математическое выражение законов природы, как, например, законы Ньютона классической механики. Пытаться *вывести* его, пользуясь только логическими рассуждениями, строго говоря, бесполезно – оно установлено, в том числе, на основе анализа экспериментальной информации. В частности, как мы только что говорили, требование описания экспериментально наблюдаемых волновых свойств частиц диктует необходимость использования непрерывной функции координат. Кроме того, важным является *выполнение принципа соответствия*, поскольку в противном случае предсказания квантовой теории вошли бы в противоречие с многочисленными результатами экспериментов, свидетельствующих о справедливости классической механики в ее области применимости. Ниже мы проверим, что принцип соответствия, сформулированный применительно к движению волнового пакета, действительно выполняется. При этом, мы не будем пытаться доказать, что формулы квантовой теории – единственно возможные, удовлетворяющие сформулированным предпосылкам (этот вопрос попросту выходит за рамки нашего курса). Смысла искать какую-либо другую теорию, удовлетворяющую тем же предпосылкам, в любом случае немного – правильность имеющейся теории с момента ее создания доказана многочисленными экспериментальными проверками.

Как уже говорилось в первой лекции, уравнение Шредингера – не единственная из известных формулировок квантовой теории. Более того, другая из формулировок – матричная механика Гейзенберга – появилась годом раньше, чем теория Шредингера. Преимущество подхода Шредингера состоит прежде всего в том, что он позволяет легко понять математическую природу корпускулярно-волнового дуализма в квантовой теории. Кроме того, если речь идет о простых системах, уравнение Шредингера легко решать – мы убедимся в этом на следующих лекциях. Поэтому мы, следуя большинству курсов квантовой теории, будем опираться именно на Шредингеровский метод описания квантовых систем.

2.5 Вывод уравнений движения волнового пакета

При наличии зависящего от координат потенциала $U(\mathbf{r})$ волновую функцию уже невозможно представить в виде суперпозиции плоских волн, эволюционирующих во времени независимым образом. Более того, для произвольной зависимости $U(\mathbf{r})$ аналитическое решение уравнения Шредингера найти не удастся, даже в одномерном случае. Можно, однако, вспомнить, что нас интересует только поведение решения в классическом пределе. В этом случае, размер волнового пакета можно считать малым по сравнению с характерным масштабом, на котором меняется потенциал $U(\mathbf{r})$ (напомним, что формально классический предел соответствует условию $\hbar \rightarrow 0$, что, в соответствии с (2.3), означает возможность сделать неопределенности координаты и импульса сколь угодно малыми). Тогда, считая изменение потенциала на масштабах волнового пакета медленным, можно разложить $U(\mathbf{r})$ в ряд Тейлора вблизи $\langle r \rangle$ и ограничиться только линейным членом в разложении: $U \approx U(\langle r \rangle) + \frac{\partial U}{\partial r}(r - \langle r \rangle)$. С использованием такого приближения, можно вычислить, как меняются во времени средние значения координаты

и импульса.

Выведем вначале формулу для изменения среднего значения координаты. Действуем аналогично проверке сохранения нормировки. Вместо формулы (2.6) получается

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \int \psi^* x \psi dx = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* x \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x)\psi \right) dx - \frac{1}{i\hbar} \int \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x)\psi \right)^* x \psi dx. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Видно, что содержащие $U(x)$ слагаемые вновь сокращаются, а вместо (2.7) получается

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle = \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \left(- \int \psi^* x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx + \int \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} x \psi dx \right). \quad (2.10)$$

Появление дополнительного множителя x меняет результат интегрирования по частям:

$$\int \psi^* x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx = - \int \frac{\partial \psi}{\partial x} d(x\psi^*) = - \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \frac{\partial \psi}{\partial x} dx - \int \frac{\partial \psi}{\partial x} x \psi^* dx$$

и

$$\int \psi x \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} dx = - \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} d(x\psi) = - \int \frac{\partial \psi}{\partial x} x \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx - \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi dx$$

При вычислении разности этих выражений, сокращаются только первые слагаемые. Вторые же слагаемые различаются знаком: $\int \frac{\partial \psi}{\partial x} x \psi^* dx = - \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi dx$ (это легко проверить интегрированием по частям). Таким образом, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle = 2 \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} x dx, \quad (2.11)$$

то есть

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}. \quad (2.12)$$

Теперь, аналогичным образом, получим формулу для производной среднего значения импульса. На этот раз, вместо формулы (2.6) имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle p \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi dx = \\ &= \int \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x)\psi \right) dx - \int \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x)\psi \right)^* \frac{\partial}{\partial x} \psi dx. \end{aligned} \quad (2.13)$$

В этом случае, в противоположность формуле (2.9), сокращаются слагаемые, содержащие массу: как нетрудно проверить однократным интегрированием по частям, каждое из этих слагаемых равно $\frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx$. Остаются только слагаемые, содержащие $U(x)$, которые мы запишем в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle p \rangle = \int \psi^* \left(\frac{\partial}{\partial x} U(x) - U(x) \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx. \quad (2.14)$$

Для того, чтобы продвинуться дальше, необходимо конкретизировать вид потенциала $U(x)$. Как мы говорили, мы рассматриваем случай, когда неопределенность координаты мала по сравнению с характерным масштабом, на

котором меняется $U(x)$, так что можно ограничиться первыми членами ряда Тейлора: $U \approx U(\langle x \rangle) + \frac{\partial U}{\partial x}|_{x=\langle x \rangle}(x - \langle x \rangle)$. Подставляя это выражение в формулу (2.14) и используя соотношение $\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = \psi + x\frac{\partial\psi}{\partial x}$, получаем искомую формулу

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle p \rangle = - \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x=\langle x \rangle}. \quad (2.15)$$

Полученные формулы (2.12) и (2.15) совпадают с уравнениями движения классической механики, что и означает выполнение принципа соответствия применительно к движению волнового пакета⁶.

Дополнительный материал и задачи для семинарских занятий

2.А Операторная алгебра в квантовой механике.

Пришло время обсудить математический аппарат квантовой механики - алгебру линейных операторов, уже знакомую по курсу линейной алгебры. По определению оператор задает соответствие между элементами двух множеств. В квантовой механике линейный оператор \hat{L} , действуя на некую волновую функцию φ , дает в результате какую-то другую функцию $\psi = \hat{L}\varphi$.

Если мы зададим некий ортонормированный базис $\{\varphi_n\}$: $\int \varphi_m^* \varphi_n dx = \delta_{nm}$, то результат действия оператора на любую волновую функцию $\psi = \sum a_n \varphi_n$ может быть выражен через матрицу т.н. матричных элементов оператора $L_{nm} = \int \varphi_m^* \hat{L} \varphi_n dx$, представляющих собой скалярное произведение базисного вектора на результат действия оператора на другой базисный вектор. В линейной алгебре мы обозначили бы такую конструкцию выражением вида $(\varphi_m | \hat{L} \varphi_n)$. В квантовой физике приняты немного иные обозначения, именно, пишут $\langle \varphi_m | \hat{L} | \varphi_n \rangle$, а сами волновые функции записывают в виде $|\varphi\rangle$. Кроме того, волновую функцию принято нормировать на единицу $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$ - существенным является направление вектора, но не его длина.

Важнейшим свойством формул линейной алгебры является их инвариантность относительно выбранного базиса: если мы выберем другой набор базисных функций $\tilde{\varphi}_{n'} = \sum_n u_{nn'} \varphi_n$, вид формул и результаты вычисления останутся неизменными (хотя, разумеется, коэффициенты a_n и матричные элементы L_{nm} поменяются согласно формулам преобразования базиса). Не

⁶Приведенное рассуждение позволяет понять происхождение формулы для среднего значения импульса, приведенную выше. Те же, кому появление этой формулы по-прежнему не нравится, могут самостоятельно убедиться в выполнении принципа соответствия, проверив формулу $\frac{\partial^2 \langle x \rangle}{\partial t^2} = - \frac{\partial U}{\partial x}$, в которую импульс не входит

содержащая индексов 'векторная' нотация как раз и подчеркивает это обстоятельство⁷.

Кратко перечислим важные для нас свойства линейных операторов.

1. Оператор является линейным, если для произвольных функций φ и ψ выполняется условие $\hat{L}(\alpha\psi + \beta\varphi) = \alpha\hat{L}\psi + \beta\hat{L}\varphi$.

2. Произведением операторов является оператор, действующий на функцию так же, как последовательное действие этих двух операторов. Умножение операторов, вообще говоря, некоммутативно. Как мы увидим, коммутатор операторов $[\hat{A}\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ играет важную роль в квантовой механике.

3. Для любого оператора можно ввести сопряженный ему оператор, который определяется следующим равенством $\langle\psi|\hat{L}^+|\varphi\rangle = (\langle\varphi|\hat{L}|\psi\rangle)^*$. Очевидные свойства сопряженного оператора: $(\hat{L}^+)^+ = \hat{L}$, $(\alpha\hat{L})^+ = \alpha^*\hat{L}^+$. Также несложно показать, что $L_{ij}^+ = L_{ji}^*$, $(\hat{M}\hat{L})^+ = \hat{L}^+\hat{M}^+$.

4. Оператор называется эрмитовым, если он совпадает с сопряженным ему оператором $\hat{L}^+ = \hat{L}$. Очевидно, любой оператор можно разложить на сумму эрмитовой и антиэрмитовой части $\hat{L} = \hat{M} + i\hat{N}$, где $\hat{M} = (\hat{L} + \hat{L}^+)/2$ и $\hat{N} = (\hat{L} - \hat{L}^+)/2i$ - эрмитовы. Произведение эрмитовых операторов является эрмитовым, только если эти операторы коммутируют: $\hat{N}^+ = (\hat{M}\hat{L})^+ = \hat{L}^+\hat{M}^+ = \hat{L}\hat{M}$. Матричные элементы эрмитовых операторов всегда действительны.

Помимо собственно математического аппарата операторной алгебры необходимо определить, каким именно образом этот аппарат применяется в квантовой механике. Это задается следующими аксиомами:

- волновые функции $|\varphi\rangle$ описывают различные состояния квантовой системы;
- каждому измеримому (наблюдаемому) параметру квантовой системы соответствует какой-то эрмитов оператор;
- среднее значение параметра квантовой системы определяется матричным элементом соответствующего ему оператора в данном квантовом состоянии, например, среднее значение координаты частицы в состоянии $|\psi\rangle$ определяется матричным элементом оператора координаты $\bar{x} = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle$.

Внимательный слушатель мог заметить, что в начале разговора об использовании линейной алгебры мы сделали одно существенное упрощение - предположили, что набор $\{\varphi_n\}$ включает *конечное число* базисных функций. В общем случае волновая функция, являясь произвольной функцией координат, в виде суперпозиции конечного числа заданных базисных функций разложена быть не может. То есть, операторы действуют в бесконечномерном (гильбертовом) пространстве. Однако сути дела сказанное не меняет - большая часть утверждений из линейной алгебры, установленных для конечномерных пространств, сохраняет свою силу. В рамках нашего курса разница между гильбертовым пространством и пространством конечной

⁷Вообще говоря, не стоит представлять себе векторы и тензоры как массивы чисел. Лучше думать о них как о неких абстрактных объектах, которые сами по себе от выбора базиса не зависят, но для которых *для каждого заданного базиса* можно вычислить набор координат. Собственно, именно такому взгляду и ушат в линейной алгебре, однако наглядный образ 'таблички с числами' почему-то пересиливает. Но ведь неправильно думать, что, например, такая векторная величина, как сила тяжести, меняется при повороте системы координат. Очевидно, физический объект - сила тяжести - остается неизменным, а меняются только представление этого вектора в выбранных координатах.

размерности не существенна.

Важное значение для квантовой механики играют собственные функции (СФ) $|\psi_n\rangle$ и собственные значения (СЗ) λ_n оператора - решения уравнения $\hat{L}|\psi_n\rangle = \lambda_n|\psi_n\rangle$.

СЗ эрмитовых операторов действительны $\lambda_n = \lambda_n^*$, поэтому если квантовая система находится в собственном состоянии $|\psi_n\rangle$ какого-то оператора \hat{L} , то при измерении параметра L мы всегда будем получать его СЗ λ_n , а его дисперсия будет равна нулю.

Кроме того, система СФ оператора является полной системой (базисом). СФ эрмитова оператора, относящиеся к разным СЗ, ортогональны $\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm}$. Поэтому если все СЗ эрмитова оператора различаются, то его СФ образуют ортонормированный базис. Но даже если для одного СЗ оператора существует несколько СФ (такие СЗ называются вырожденными), то из них всегда можно построить соответствующее число их линейных комбинаций, которые будут взаимно ортогональными (ортогонализация по Шмидту): $|\varphi_1\rangle = |\psi_1\rangle$; $|\varphi_2\rangle = |\psi_1\rangle - (|\psi_1|^2/\langle\psi_1|\psi_2\rangle)|\psi_2\rangle$; и т.д.

Наконец, если два оператора имеют общую систему СФ, то они коммутируют: $\hat{L}\hat{M}|\psi_n\rangle = \hat{L}\mu_n|\psi_n\rangle = \mu_n\lambda_n|\psi_n\rangle = \hat{M}\hat{L}|\psi_n\rangle$, обратное тоже верно.

В завершение рассмотрим строгий вывод соотношения неопределенностей Гейзенберга. Рассмотрим оператор вида $\hat{L}^+\hat{L}$. Его среднее значение всегда неотрицательно. Действительно, $\langle\psi|\hat{L}^+\hat{L}|\psi\rangle = \langle\hat{L}\psi|\hat{L}\psi\rangle = |\hat{L}\psi|^2 \geq 0$. Рассмотрим оператор $\hat{L} = \hat{x} - \bar{x} - i\gamma(\hat{y} - \bar{y})$, где \hat{x} и \hat{y} - эрмитовы операторы, \bar{x} и \bar{y} - их средние значения, и $[\hat{x}\hat{y}] = i\bar{A}$. Тогда неотрицательным оказывается выражение

$$\langle\psi|(\Delta x)^2 + \gamma^2(\Delta y)^2 + i\gamma[\hat{x}\hat{y}]|\psi\rangle = (\Delta x)^2 + \gamma^2(\Delta y)^2 - \gamma\bar{A} \geq 0$$

Для выполнения этого неравенства для любых γ детерминант этого трехчлена должен быть неположителен, откуда получаем неравенство $(\Delta x)^2(\Delta y)^2 \geq \bar{A}^2/4$. Это точное выражение для соотношения неопределенностей Гейзенберга. В частности, для дисперсий операторов координаты и импульса получаем $(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \hbar^2/4$.

Задачи.

1. Найти коммутатор операторов координаты \hat{x} и импульса $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$.

Решение: $[\hat{x}\hat{p}]\varphi(x) = -i\hbar x \frac{d\varphi}{dx} + i\hbar \frac{d}{dx}(x\varphi) = i\hbar\varphi(x)$. Отсюда следует, что $[\hat{x}\hat{p}] = i\hbar$.

2. Пусть $[\hat{a}\hat{b}] = 1$. Найти $[\hat{a}^2\hat{b}^2]$.

3. Доказать тождество Якоби $[\hat{a}[\hat{b}\hat{c}]][\hat{b}[\hat{c}\hat{a}]] + [\hat{c}[\hat{a}\hat{b}]] = 0$.

4. Найти коммутаторы матриц Паули $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$; $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$; $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

5. Найти СЗ и СФ оператора проекции на состояние $|A\rangle$: $\hat{P}_A = |A\rangle\langle A|$.

Решение: Легко видеть, что $\hat{P}_A^2 = \hat{P}_A$. Отсюда следует, что у оператора ровно два СЗ: $\lambda = 0; 1$. Несложно также записать СФ этого оператора: $|\psi_1\rangle = |A\rangle$; $|\psi_2\rangle = (1 - \hat{P}_A)|\psi\rangle$, где $|\psi\rangle$ - любая функция, не совпадающая с $|A\rangle$.

6. Найти СЗ и СФ оператора инверсии $\sigma|\psi(x)\rangle = |\psi(-x)\rangle$.

Глава 3

Простейшие модели квантовой механики

3.1 Стационарное уравнение Шредингера

Уравнение Шредингера, введенное в рассмотрение выше, позволит нам описать свойства квантовых систем, сначала на примере простейших моделей, а затем – применительно к реальным объектам. В первую очередь, нас будут интересовать системы, для которых потенциал $U(\mathbf{r})$ является стационарным, то есть не зависит от времени. В этом случае естественно ожидать, что хотя бы некоторые из возможных состояний системы также окажутся стационарными. В этом месте, однако, необходимо остановиться и уточнить определения. Под стационарными естественно понимать состояния, *физические свойства* которых не зависят от времени. Как мы говорили на прошлой лекции, *не вся информация, заключенная в волновой функции системы, является физически значимой – величина фазового множителя перед волновой функцией не несет физического смысла*. Соответственно, волновая функция стационарных состояний может зависеть от времени, но эта зависимость должна ограничиваться фазовым множителем: волновая функция должна иметь вид $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{i\phi(t)}$, где $\phi(t)$ – некоторая действительная функция времени (но не координаты!). Величину $\psi(\mathbf{r})$ называют *волновой функцией стационарного состояния*. Ее обозначают тем же символом, что и полную волновую функцию $\psi(\mathbf{r}, t)$; мы будем различать эти величины, явно указывая их аргументы.

Подставляя формулу $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{i\phi(t)}$ в уравнение Шредингера, можно убедиться, что производная $\phi(t)$ не должна зависеть от времени. Соответственно, сама эта функция может зависеть от времени только линейно. Мы запишем эту линейную зависимость в следующем виде: $\phi(t) = -E(t - t_0)/\hbar$, где E, t_0 – некоторые коэффициенты. Величина t_0 определяет начало отсчета времени и может быть выбрана произвольной; для простоты мы положим ее равной нулю. Таким образом, волновая функция стационарного состояния имеет вид:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}. \quad (3.1)$$

Свойства волновой функции стационарного состояния определяются *стационарным уравнением Шредингера*:

$$E\psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}), \quad (3.2)$$

которое получается прямым дифференцированием по времени волновой функции стационарного состояния.

Введенная нами величина E с размерностью энергии представляет собой энергию стационарного состояния. Для того, чтобы убедиться в этом, достаточно домножить обе части стационарного уравнения Шредингера на $\psi^*(\mathbf{r})$ и проинтегрировать по координате. Слева получается $E \int \psi^* \psi d^3r$, то есть просто E , а справа – среднее значение полной энергии.

3.2 Стационарные состояния свободной частицы

В качестве примера рассмотрим стационарные состояния свободной частицы (то есть, частицы в отсутствие потенциала). Стационарное уравнение

Шредингера в этом случае имеет вид

$$E\psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (3.3)$$

Подстановкой легко убедиться, что решениями этого уравнения являются плоские волны $\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$ с произвольным значением импульса p и *законом дисперсии* $E(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m}$. Как мы видим, допустимые значения энергии лежат в непрерывном интервале $[0, +\infty)$. В таком случае, принято говорить о *непрерывном спектре*.

Отметим определенную сложность – решение в виде плоской волны не удовлетворяет условию нормировки $\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} = 1$. Более того, это условие невозможно выполнить, домножив $\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$ на какой-либо конечный множитель. Физически, ситуация совершенно ясна – в рассматриваемом нами случае вероятность обнаружить частицу в любой из точек пространства одинакова, а поскольку пространство неограниченно, эта вероятность оказывается равной нулю¹. Таким образом, невозможность обеспечить нормировку стационарных состояний связана с инфинитным (неограниченным в пространстве) характером движения свободной частицы. В действительности, описанные сложности с нормировкой носят исключительно формальный характер, и могут быть разрешены. Мы этим, однако, пока заниматься не будем, а вместо этого рассмотрим ситуацию, в которой движение частицы ограничено некоторой конечной областью, то есть, рассмотрим систему со *связанными состояниями*. Такая ситуация имеет место для частицы, находящейся в некоторой потенциальной яме. В этом случае проблемы с нормировкой отсутствуют.

3.3 Прямоугольная потенциальная яма. Дискретный спектр

Для простоты, будем рассматривать свойства одномерного движения. Рассмотрим так называемую прямоугольную потенциальную яму $U(x) = -U_0, |x| < x_0$; $U(x) = 0, |x| > x_0$. Проще всего заметить, что стационарное уравнение Шредингера с постоянным потенциалом математически эквивалентно уравнению движения классической частицы в гармоническом осцилляторе, с которым студенты знакомятся в курсе механики:

$$\ddot{q} = -\Omega^2 q \quad (3.4)$$

При этом положение осциллятора q играет роль волновой функции, а координата в уравнении Шредингера полностью эквивалентна времени для классической задачи: $q \leftrightarrow \psi, t \leftrightarrow x, E - U \leftrightarrow \Omega^2$.

В свете этой аналогии несложно написать выражения, определяющие поведение волновой функции в областях $x < -x_0$ и $x > x_0$. Рассмотрим для примера первую из них. Если $E > 0$, в полной аналогии с задачей о классическом осцилляторе, решение стационарного уравнения Шредингера при равном нулю потенциале в общем виде представляет собой суперпозицию двух плоских волн $\psi(x < -x_0) = a_+ e^{i\sqrt{2mEx}/\hbar} + a_- e^{-i\sqrt{2mEx}/\hbar}$. При

¹Локализовать частицу можно было бы, собрав из плоских волн волновой пакет, но состояние волнового пакета не является стационарным.

$E < 0$ выражение остается формально неизменным, однако фактически представляет собой суперпозицию нарастающей и спадающей экспонент² $\psi(x > -x_0) = a_+ e^{\sqrt{2m|E|x/\hbar}} + a_- e^{-\sqrt{2m|E|x/\hbar}}$. В том, что выписанные выражения действительно являются решениями уравнения Шредингера, нетрудно убедиться и прямой подстановкой.

Видно, что интересующее нас решение, допускающее выполнение условия нормировки, оказывается возможным только при отрицательных значениях энергии, и при условии обращения в нуль коэффициента при той из экспонент, которая растет при движении к минус бесконечности. Получаем

$$\psi(x < -x_0) = a_+ e^{\sqrt{2m|E|x/\hbar}}.$$

Анализ поведения волновой функции на интервале $x > x_0$ полностью аналогичен; разница заключается только в том, что теперь необходимо требовать обращения в нуль экспоненты, нарастающей в $+\infty$, то есть имеющей знак ‘минус’ в показателе. Получаем

$$\psi(x > x_0) = c_+ e^{-\sqrt{2m|E|x/\hbar}}.$$

Наконец, на интервале $-x_0 < x < x_0$ волновая функция также представляет собой суперпозицию двух экспонент, но содержащих в показателе не E , а $E + U_0$:

$$\psi(-x_0 < x < x_0) = b_+ e^{i\sqrt{2m(E+U_0)x/\hbar}} + b_- e^{-i\sqrt{2m(E+U_0)x/\hbar}}.$$

В этом случае никаких специальных условий на коэффициенты b_+, b_- не возникает.

Осталось выяснить, что происходит с волновой функцией непосредственно в точках разрыва потенциала. Вновь обратимся к формальной аналогии с гармоническим осциллятором. Скачок потенциала в точках $\pm x_0$ соответствует мгновенному изменению силы, действующей на классическую частицу. Такое изменение, в соответствии со вторым законом Ньютона, приводит к мгновенному изменению ускорения частицы, в то время как мгновенные значения ее координаты и скорости остаются неизменными. Возвращаясь к уравнению Шредингера, заключаем, что *в точках скачков потенциала волновая функция и ее первая производная не меняются.*

Этого условия оказывается достаточно для того, чтобы сформулировать уравнения, связывающие коэффициенты a_+, b_-, b_+, c_- . Условие непрерывности волновой функции на левой границе (в точке $x = -x_0$):

$$a_+ e^{-\sqrt{2m|E|x_0/\hbar}} = b_+ e^{-i\sqrt{2m|E+U_0|x_0/\hbar}} + b_- e^{i\sqrt{2m|E+U_0|x_0/\hbar}}.$$

Условие непрерывности производной в той же точке

$$\sqrt{2m|E|} a_+ e^{-\sqrt{2m|E|x_0/\hbar}} = \sqrt{2m|E+U_0|} \left(b_+ e^{-i\sqrt{2m|E+U_0|x_0/\hbar}} - b_- e^{i\sqrt{2m|E+U_0|x_0/\hbar}} \right).$$

Аналогичные уравнения выражают условия непрерывности на правой границе:

²В этом случае в классической задаче следует говорить о гармоническом акселераторе – задаче о частице, движущейся в ‘перевернутом’ потенциале гармонического осциллятора

$$c_- e^{-\sqrt{2m|E|x_0/\hbar}} = b_+ e^{i\sqrt{2m|E+U_0|x_0/\hbar}} + b_- e^{-i\sqrt{2m|E+U_0|x_0/\hbar}};$$

$$-\sqrt{2m|E|} c_- e^{-\sqrt{2m|E|x_0/\hbar}} = \sqrt{2m|E+U_0|} \left(b_+ e^{i\sqrt{2m|E+U_0|x_0/\hbar}} - b_- e^{-i\sqrt{2m|E+U_0|x_0/\hbar}} \right).$$

У нас получилась система из четырех уравнений, являющаяся линейной и однородной относительно коэффициентов a_+, b_-, b_+, c_- . Нетривиальное решение соответствует обращению в нуль детерминанта составленной из коэффициентов матрицы. Приравнявая указанный детерминант нулю, мы получим (нелинейное) уравнение на величину энергии E .

Описанная программа действий вполне выполнима, хотя и требует некоторого количества выкладок. Мы, однако, пойдем по несколько другому, более простому пути, а именно воспользуемся тем обстоятельством, что рассматриваемый потенциал является *четным*, то есть удовлетворяет условию $U(x) = U(-x)$.

Как можно проверить, решения уравнения Шредингера с четным потенциалом удовлетворяют следующему условию: если волновая функция $\psi(x)$ является решением при некоторой энергии E , то решением для этого значения является и функция $\psi(-x)$. Когда мы получим решение, мы убедимся, что для нашей задачи каждому допустимому значению энергии соответствует только одна волновая функция (как принято говорить, уровни *не вырождены*). Это значит, что на самой функции $\psi(x)$ и $\psi(-x)$ совпадают, с точностью до фазового множителя: $\psi(x) = e^{i\phi} \psi(-x)$. Применяя такое преобразование дважды, $\psi(x) = e^{i\phi} \psi(-x) = e^{i\phi} e^{i\phi} \psi(-(-x))$, убеждаемся, что квадрат этого фазового множителя равен единице, а сам множитель, следовательно, равен или 1, или минус единице. Первый случай соответствует четной волновой функции, $\psi(x) = \psi(-x)$, второй – нечетной, $\psi(x) = -\psi(-x)$.

Рассмотрим случай четной волновой функции. На языке введенных выше коэффициентов a_+, b_-, b_+, c_- четность $\psi(x)$ означает выполнение равенств

$$a_+ = c_-, \quad b_- = b_+.$$

Поскольку из четырех коэффициентов независимыми являются только два, достаточно потребовать выполнения условий непрерывности волновой функции и ее производной только на одной границе ямы; для другой границы эти условия должны удовлетворяться автоматически. Учитывая, что для четных решений волновая функция в области ямы может быть записана в виде $2b_+ \left(\cos \sqrt{2m|E+U_0|x/\hbar} \right)$, получаем следующие уравнения:

$$a_+ e^{-\sqrt{2m|E|x_0/\hbar}} = 2b_+ \cos \left(\sqrt{2m|E+U_0|x_0/\hbar} \right)$$

$$\sqrt{2m|E|} a_+ e^{-\sqrt{2m|E|x_0/\hbar}} = 2b_+ \sqrt{2m|E+U_0|} \sin \left(\sqrt{2m|E+U_0|x_0/\hbar} \right) \quad (3.5)$$

Разделив одно из этих уравнений на другое, получаем уравнение, определяющее допустимые уровни энергии четных состояний

$$\sqrt{2m|E|} = \operatorname{tg} \left(\sqrt{2m|E+U_0|x_0/\hbar} \right) \quad (3.6)$$

Случай нечетной волновой функции полностью аналогичен; уравнение для уровней энергии получается следующее:

$$\sqrt{2m|E|} = \operatorname{ctg} \left(\sqrt{2m|E + U_0|x_0/\hbar} \right) \quad (3.7)$$

Напомним, что, по постановке задачи, корни этих уравнений следует искать в интервале $-U_0 < E < 0$.

На примере рассмотренной системы можно проиллюстрировать некоторые важные вопросы общего плана. Прежде всего, мы видим, что *спектр связанных (локализованных) состояний является дискретным*, то есть связанные стационарные состояния существуют только для определенных значений энергии. Это принципиально отличает их от *состояний непрерывного спектра, отвечающих неограниченному движению частицы в пространстве*.

Как мы видели, с формальной точки зрения появление дискретного спектра связано с появлением ‘дополнительного’ требования спада волновой функции на бесконечности. В нашем примере пришлось потребовать обращения в нуль коэффициентов a_+ , b_- , из-за чего нетривиальное решение уравнений оказалось возможным только при определенном соотношении коэффициентов, то есть при выделенных значениях энергии.

Физически же волновые функции связанных состояний внутри прямоугольной потенциальной ямы представляют собой стоячую волну, для которой выполняются определенные фазовые соотношения на границах ямы. Выполнение этих соотношений оказывается возможным только для дискретного набора значений энергии (вспомните де-Бройлевскую интерпретацию правила квантования Бора!). Проще всего описывать яму с бесконечно высокими стенками – в этом случае достаточно требовать обращения волновой функции на границах ямы в нуль, и разрешенные значения волнового вектора стоячей волны оказываются равны $k = 2\pi n/L$, где n – целое число.

Теперь мы можем указать способ обойти трудности с нормировкой состояний непрерывного спектра, который нам понадобится несколько позже. Идея состоит в том, чтобы ввести так называемый объем квантования. Ясно, что изменение потенциала на большом расстоянии от интересующей нас системы не влияет на ее свойства. Поэтому для формального анализа свойств непрерывного спектра можно поместить частицу в потенциальную яму со стенками бесконечной высоты, простирающуюся от $-L/2$ до $L/2$, где $L \rightarrow \infty$. На практике обычно поступают несколько по-другому, а именно используют так называемые периодические граничные условия $\psi(-L/2) = \psi(L/2)$. Эти условия не соответствуют, разумеется, никакому реальному потенциалу, зато приводят к очень простым волновым функциям стационарных состояний $\psi(x) = e^{ikx}$. В любом случае, введение объема квантования приводит к тому, что вместо непрерывного мы имеем дело с дискретным спектром, уровни которого расположены очень близко друг к другу (в соответствии с формулой $k = 2\pi n/L$). Соответствующие волновые функции, естественно, нормируемы.

3.4 Симметрия волновых функций

Еще одним важным обстоятельством, на которое хочется обратить внимание, является то, что связанные состояния разбились на два набора – имеющие четные и нечетные волновые функции. Существование такой *классификации состояний по четности* не является случайной особенностью модели, а следует из того, что потенциал $U(x)$ обладает определенной симметрией. В общем случае, наличие той или иной симметрии потенциала всегда приводит к появлению определенной классификации состояний. К сожалению, в рамках нашего курса не получается рассмотреть этот вопрос конкретнее, поскольку его анализ требует хотя бы начальных знаний теории групп³.

3.5 Прямоугольный потенциальный барьер: состояния непрерывного спектра

Продолжим анализ одномерного уравнения Шредингера с прямоугольным потенциалом, но перейдем к свойствам состояний непрерывного спектра. Важная особенность состоит в том, что если локализованные состояния дискретного спектра появляются только для потенциала в виде ямы, то состояния непрерывного спектра, разумеется, присутствуют как для потенциала в виде ямы, так и для *барьера* – системы с локальным возрастанием потенциальной энергии. Прямоугольная яма и прямоугольный барьер формально различаются знаком величины U . Формулы, которые мы получим сегодня, применимы в обоих случаях; однако, физически более интересно рассмотреть задачу о барьере, что мы и сделаем. Пусть, как и раньше, барьер расположен на отрезке $[-x_0, x_0]$; высоту барьера обозначим U_b .

Вспомним сначала, как выглядят состояния непрерывного спектра свободной частицы. Они представляют собой плоские волны $e^{ipx/\hbar}$, физически соответствующие частице с определенным импульсом p . Например, в случае положительного p , эта частица порождается источником в ‘минус бесконечности’, пролетают всю действительную ось, и ‘уходят в плюс бесконечность’.

Рассмотрим теперь систему с барьером и построим для нее состояния непрерывного спектра, которые по-прежнему описывают систему с источником в ‘в минус бесконечности’. Результатом рассеяния частицы на барьере в нашей задаче может быть либо прохождение через барьер и уход в ‘плюс бесконечность’, либо ее отражение в ‘минус бесконечность’⁴. Будем действовать аналогично задаче о поиске состояний дискретного спектра – найдем вид решения уравнения Шредингера на участках постоянного потенциала, а затем организуем сшивку полученных решений.

Энергия частиц равна $E = \frac{p^2}{2m}$. Соответственно, в областях вне барьера решение уравнения Шредингера может представлять собой суперпозицию двух плоских волн $e^{ipx/\hbar}$, $e^{-ipx/\hbar}$ с некоторыми коэффициентами, а в области барьера – суперпозицию функций $e^{\pm\sqrt{2m(U_b-E)}x/\hbar}$. Сразу отметим, что,

³Для тех, кто такими знаниями обладает, укажем, что волновые функции классифицируются по неприводимым представлениям группы симметрии системы.

⁴‘Залипания’ частицы на барьере в таких задачах не возникает.

в зависимости от знака $U_b - E$ эти функции представляют собой либо плоские волны (для $U_b - E < 0$), либо спадающую и нарастающую экспоненты (в обратном случае). Различие двух указанных случаев с точки зрения классической физики очевидно: если высота барьера меньше энергии частицы ($U_b - E < 0$), классическая частица преодолевает его и движется дальше, в противоположном же случае – отражается обратно.

Определим теперь граничные условия. В области слева от барьера интересующее нас решение должно содержать набегающую из ‘минус бесконечности’ волну $e^{ipx/\hbar}$. Отраженная волна также может присутствовать, то есть в области $x < -x_0$ решение имеет вид

$$\psi(x < -x_0) = a_+ e^{ipx/\hbar} + a_- e^{-ipx/\hbar}.$$

В области же справа от барьера ситуация другая – источников в ‘плюс бесконечности’ нет, поэтому волна $e^{-ipx/\hbar}$ в этой области отсутствует:

$$\psi(x > x_0) = c_+ e^{ipx/\hbar}.$$

Наконец, в области барьера допустимы оба решения

$$\psi(-x_0 < x < x_0) = b_+ e^{\sqrt{2m(U_b - E)}x/\hbar} + b_- e^{-\sqrt{2m(U_b - E)}x/\hbar}$$

(граничные условия на бесконечности не имеют к этой области прямого отношения).

Вероятность прохождения частицы сквозь барьер, очевидно, определяется отношением квадратов модулей соответствующих плоских волн $|c_+/a_+|^2$. Аналогично, вероятность отражения равна $|a_-/a_+|^2$. Поскольку нас интересует отношение коэффициентов, нормировка волновой функции неважна, и один из коэффициентов может быть выбран произвольно. В соответствии с общепринятой практикой, мы выберем

$$a_+ = 1,$$

и будем вычислять просто квадраты модулей коэффициентов c_+, a_- .

Учтем, наконец, непрерывность волновой функции и ее производной на границах барьера. На левой границе (в точке $x = -x_0$) эти условия соответствуют равенствам

$$\begin{aligned} e^{-ipx_0/\hbar} + a_- e^{ipx_0/\hbar} &= b_+ e^{-\sqrt{2m(U_b - E)}x_0/\hbar} + b_- e^{\sqrt{2m(U_b - E)}x_0/\hbar} \\ ipx_0(e^{-ipx_0/\hbar} - a_- e^{ipx_0/\hbar}) &= \sqrt{2m(U_b - E)}(b_+ e^{-\sqrt{2m(U_b - E)}x_0/\hbar} + b_- e^{\sqrt{2m(U_b - E)}x_0/\hbar}) \end{aligned} \quad (3.8)$$

а на правой (в точке $x = x_0$) –

$$\begin{aligned} c_+ e^{ipx_0/\hbar} &= b_+ e^{-\sqrt{2m(U_b - E)}x_0/\hbar} + b_- e^{\sqrt{2m(U_b - E)}x_0/\hbar} \\ ipx_0 c_+ e^{ipx_0/\hbar} &= \sqrt{2m(U_b - E)}(b_+ e^{-\sqrt{2m(U_b - E)}x_0/\hbar} + b_- e^{\sqrt{2m(U_b - E)}x_0/\hbar}) \end{aligned} \quad (3.9)$$

Как и при анализе состояний дискретного спектра, у нас получилась система из четырех уравнений с четырьмя неизвестными коэффициентами. Однако, теперь мы имеем дело с *неоднородной* системой, что физически связано с наличием источника в бесконечности. К сожалению, воспользоваться симметрией задачи не удастся, поскольку наличие источника указанную симметрию нарушает. Тем не менее, решить систему несложно, или

потратив некоторое время на выкладки, или воспользовавшись одной из программ для аналитических преобразований. Приведем сразу результат. В полученных формулах нас, прежде всего, будет интересовать амплитуда волны, прошедшей через барьер, то есть коэффициент c_+ , который оказывается равным

$$c_+ = \frac{4ip\sqrt{2m(U_b - E)}e^{-2ipx_0/\hbar}}{\left(ip + \sqrt{2m(U_b - E)}\right)^2 e^{-2x_0\sqrt{2m(U_b - E)}/\hbar} - \left(ip - \sqrt{2m(U_b - E)}\right)^2 e^{2x_0\sqrt{2m(U_b - E)}/\hbar}} \quad (3.10)$$

Хотя полученное выражение кажется довольно громоздким, его анализ не составляет труда. Прежде всего, видно, что величина c_+ отлична от нуля при любой высоте барьера, в том числе и для ‘классически непреодолимого’ барьера $U_b > E$ (общий ход зависимости вероятности прохождения $|c_+|^2$ от энергии падающей частицы приведен на рисунке). Таким образом, мы заключаем, что в квантовой физике *существует отличная от нуля вероятность прохождения частицы через барьер, как бы высок этот барьер не был.* Явление прохождения квантовой частицы через классически непреодолимые препятствия называют *туннельным эффектом.*

Заметим далее, что в пределе $\sqrt{2m(U_b - E)}x_0 \gg \hbar$ (то есть, для достаточно широкого и/или высокого барьера) в знаменателе полученной формулы доминирует одна из экспонент, то есть

$$c_+ \approx \frac{4ip\sqrt{2m(U_b - E)}e^{-2ix_0p/\hbar}}{\left(ip - \sqrt{2m(U_b - E)}\right)^2} e^{-2x_0\sqrt{2m(U_b - E)}/\hbar}. \quad (3.11)$$

Таким образом, вероятность прохождения частицы через барьер пропорциональна

$$|c_+|^2 \propto e^{-2L\sqrt{2m(U_b - E)}/\hbar},$$

где $L = 2x_0$ – ширина барьера. Эта величина экспоненциально быстро падает с ростом высоты или ширины барьера, так что, как правило, туннельный эффект весьма мал.

Однако принципиальная возможность тунnelирования – исключительный важный и интересный физический эффект. Его происхождение можно понять, глядя на ‘устройство’ волновых функций дискретного спектра, которые мы рассматривали на прошлой лекции. Действительно, эта волновая

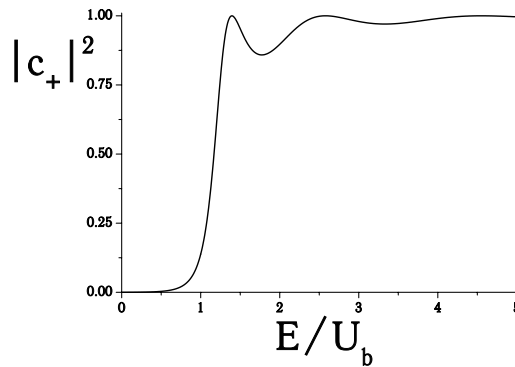


Рис. 3.1: Вид зависимости вероятности прохождения $|c_+|^2$ от энергии падающей частицы.

функция не обращается в нуль в области вне ямы, но содержит в этой области экспоненциально спадающие ‘хвосты’. Это и означает, что существует ненулевая вероятность обнаружить частицу в подбарьерной (классически запрещенной) области. Если рассмотреть потенциал, состоящий из двух барьеров и поместить частицу в яму между ними, то из-за возможности проникновения частицы в подбарьерную область состояния дискретного спектра ямы окажутся неустойчивыми – частица будет иметь ненулевую вероятность туннелировать сквозь барьер и улететь на бесконечность. Вероятность этого процесса описывается такой же экспонентой, как мы выписали выше. Однако, существует важная разница между рассмотренном выше случаем частицы, отражающейся от барьера, и запертой в яме между двумя барьерами. В случае отражения от барьера физически ясно, что частица проводит в его окрестности конечное время и наши формулы описывают (с точностью до несущественного для нас множителя) *полную вероятность туннелирования*. В случае же запертой между двумя барьерами частицы частица *всегда* находится в окрестности барьера. Очевидно, в этом случае наши формулы дают *вероятность туннелирования в единицу времени*, а именно, вероятность туннелирования за характерное время \hbar/E . Поэтому, если подождать достаточно долго, частица обязательно покинет яму и улетит на бесконечность. Иными словами, *туннельный эффект легче всего наблюдать, когда речь идет о проникновении через барьер из потенциальной ямы в свободное пространство, поскольку в этом случае малую величину эффекта можно компенсировать большим временем наблюдения*.

Разумеется, реальные потенциальные барьеры могут иметь форму, отличную от прямоугольной. В этом случае физическая возможность туннелирования сквозь барьер сохраняется, но формула, описывающая вероятность этого процесса, должна быть модифицирована. Это оказывается несложно сделать в предположении, что высота барьера медленно меняется с изменением координаты. Математически, это соответствует условию $\frac{\partial U_b}{\partial x} \ll \frac{U_b}{\lambda}$, где $\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_b - E)}}$ – характерный пространственный масштаб изменения волновой функции⁵. Как несложно проверить прямой подстановкой, при выполнении указанного сильного неравенства уравнению Шредингера удовлетворяет волновая функция⁶

$$\psi = e^{\pm \int \sqrt{2m(U_b - E)} dx / \hbar}.$$

Соответственно, вероятность туннелирования определяется выражением

$$e^{\pm 2 \int \sqrt{2m(U_b - E)} dx / \hbar}. \quad (3.12)$$

В частном случае прямоугольного барьера, для которого зависимость потенциала от координаты в области барьера вообще отсутствует, формула (3.12) дает $\int \sqrt{2m(U_b - E)} dx = \sqrt{2m(U_b - E)}x$, и мы возвращаемся к полученному ранее результату.

Рассмотрим теперь несколько примеров физических систем, в которых туннельный эффект проявляется на практике.

⁵Для области, в которой классическое движение разрешено, таким масштабом является длина волны де Бройля $\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E - U_b)}}$.

⁶Это приближение называют WKB, по именам авторов – Wentzel–Kramers–Brillouin

3.6 Теория α -распада

Как вы знаете, ядра атомов состоят из протонов и нейтронов, при этом число протонов в ядре Z определяет номер элемента в периодической системе. Для каждого из элементов существует определенное число изотопов - ядер, различающихся количеством нейтронов. Многие ядра неустойчивы относительно распада на две части, суммарное число протонов и нейтронов в которых совпадает с их количеством в исходном ядре. Устойчивость ядра относительно того или иного распада можно вычислить, подсчитав *дефект масс* – разницу масс исходного ядра и обломков. Если дефект масс положителен, это в соответствии с формулой $E = mc^2$ означает, что распад энергетически выгоден, то есть исходное ядро неустойчиво относительно данного типа распада. Избыток энергии выделяется в виде кинетической энергии продуктов распада.

Один из наиболее часто встречающихся типов распада – так называемый α -распад, при котором одним из обломков является ядро гелия-4, состоящее из двух протонов и двух нейтронов (в ядерной физике такое ядро, лишенное электронных оболочек, называют α -частицей). Неустойчивыми относительно α -распада являются многие ядра тяжелых элементов; для части этих ядер α -распад действительно наблюдается экспериментально.

α -распад был одним из первых ядерных превращений, обнаруженных физиками. К 1911 году была эмпирически установлена основная особенность этого явления – резкая зависимость времени жизни распадающегося ядра от энергии, выделяющейся в результате распада (большую часть этой энергии уносит α -частица). Конкретнее, было установлено правило Гейгера-Нетолла (H.Geiger, J.M.Nutall) – в ряду α -радиоактивных изотопов одного элемента, время жизни ядра связано с выделяемой энергией формулой

$$T \approx e^{-A+B/\sqrt{E}},$$

где A, B – некоторые (зависящие от Z) постоянные. На практике, изменение энергии α -частиц менее, чем вдвое (например, от 4 до 6 МэВ), сопровождается изменением времени жизни ядра на 7 порядков! Причины появления такой зависимости долгое время оставались необъясненными. Загадочности добавляло то обстоятельство, что обратный процесс – поглощение ядром α -частицы соответствующей энергии – наблюсти не удавалось.

Решение было найдено в 1928 году Г.Гамовым, который, собственно, и обратил внимание на проникновение волновой функции в классически запрещенную область и связанную с этим возможность туннелирования. В теории Гамова распадающееся ядро представляется как α -частица, связанная с остальными нуклонами короткодействующими ядерными силами. В этом случае появление барьера связано с кулоновским отталкиванием заряженной α -частицы и остальных нуклонов:

$$U_b = \frac{2(Z-2)e^2}{r}.$$

Поскольку энергия E при туннелировании не меняется, ее можно определить из эксперимента как энергию продуктов распада. Именно эта величина входит в формулу Гейгера-Неталла. Вероятность туннелирования определяется формулой (3.12), в которую следует подставить выписанное выраже-

ние для кулоновского потенциала⁷. Напомним, что интеграл в этой формуле вычисляется по классически запрещенной области. Эта область распространяется от малых расстояний, на которых перестают действовать ядерные силы, до точки, в которой величина кулоновского потенциала сравнивается с кинетической энергией α -частицы, $r_0 = 2(Z - 2)e^2/E$. В самом простом приближении, радиус действия ядерных сил можно положить равным нулю. Тогда вычисление дает $\int_0^{r_0} \sqrt{\frac{2(Z-2)e^2}{r} - E} dr = \frac{2(Z-2)e^2}{\sqrt{E}} \int_0^1 \sqrt{1/x - 1} dx$ (интеграл в последней формуле, разумеется, может быть вычислен, но его конкретное значение для нас сейчас не важно). Полученный результат позволяет объяснить зависимость Гейгера-Нетолла. Более того, точности экспериментальных данных и используемого приближения ВКБ оказалось достаточно, чтобы учесть отличие нижнего предела интегрирования от нуля и таким образом оценить радиусы атомных ядер. Получила объяснение и практическая невозможность наблюдать обратный туннелированию процесс – при столкновении α -частицы с ядром они контактируют очень малое время, так что вероятность прохождения сквозь туннельный барьер за это время оказывается ничтожно мала.

Работа Гамова вызвала большой резонанс в физическом сообществе. Помимо объяснения закономерностей α -распада и введения новой для физики концепции туннельного перехода, она показала, что законы квантовой физики, установленные ранее для частиц, взаимодействующих посредством электромагнитного взаимодействия, годятся также и для нуклонов, взаимодействие которых имеет совершенно другую природу. Иными словами, результаты Гамова значительно расширили установленную область применимости квантовой теории.

3.7 Спектр квантового гармонического осциллятора

Перейдем к еще одной из базовых моделей квантовой физики – гармоническому осциллятору. Нужно отметить, что эта модель гораздо более физична, чем разобранный нами ранее модель прямоугольного потенциала. Дело в том, что соответствующие этой модели системы встречаются несравнимо чаще, чем модели с прямоугольным потенциалом. Уместно сразу вспомнить классическую механику, где модель гармонического осциллятора встречается при описании малых колебаний вблизи положения равновесия практически любых систем⁸ (нужно только, чтобы вторая производная потенциала в точке минимума не обращалась в нуль).

Практическим критерием применимости модели гармонического осциллятора является независимость частоты колебаний от их амплитуды – модель гармонического осциллятора применима, если этой зависимостью мож-

⁷Разумеется, наш вывод формулы (3.12) касается только одномерных задач. Впрочем, формула для трехмерных систем полностью аналогична, при этом интеграл (3.12) вычисляется вдоль некоторой *траектории*, проходящей под барьером. Для задачи об α -распаде эта траектория – просто отрезок, направленный из центра атома.

⁸В квантовой физике ситуация несколько иная. Как вы помните, из-за соотношения неопределенностей координата квантового осциллятора не может в точности совпадать с минимумом потенциала, так что необходимо требовать, чтобы потенциал можно было приблизить параболой во всей области локализации квантовой частицы.

но пренебречь. Среди физических систем, ведущих себя как гармонические осцилляторы, следует прежде всего упомянуть фотонные моды. Рассмотрим вначале одномерный резонатор длины L , и введем простейшие граничные условия – электрическое поле обращается в нуль на его стенках, расположенных в точках $0, L$. Собственные моды этого резонатора представляют собой стоячие волны с огибающей вида $\sin(kx)$, где волновое число k должно быть выбрано таким образом, чтобы выполнялись граничные условия: $k = \frac{\pi j}{L}$, j – положительное целое число. Частота колебаний каждой из этих мод составляет $\omega = ck$, и практически не зависит от амплитуды электромагнитного поля моды⁹. Соответственно, каждая из фотонных мод представляет собой гармонический осциллятор. Также модель гармонического осциллятора пригодится нам в дальнейшем, для описания колебаний атомов в молекулах и кристаллах.

Потенциальная энергия гармонического осциллятора является квадратичной функцией координаты, так что стационарное уравнение Шредингера для этой системы имеет вид

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi \quad (3.13)$$

Здесь m – масса, ω – собственная частота осциллятора (частота колебаний классического аналога рассматриваемой системы). Мы выбрали систему координат и начало отсчета энергии таким образом, что минимум потенциала находится в начале координат и имеет нулевое значение энергии.

Прежде всего, заметим, что, в отличие от прямоугольной ямы, для рассматриваемой модели уход частицы на бесконечность невозможен – какую бы энергию частица не имела, она в любом случае оказывается запертой между растущих ветвей параболы. Поэтому *все состояния квантового гармонического осциллятора являются состояниями дискретного спектра*. Определим свойства этих состояний.

Проще всего начать с имеющего наименьшую энергию (*основного*) состояния системы. Волновая функция этого состояния имеет вид

$$\psi \propto e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}.$$

Тот факт, что эта функция удовлетворяет уравнению Шредингера, можно проверить прямой подстановкой. Эта же подстановка дает значение энергии основного состояния

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega.$$

Волновые функции и энергии остальных состояний можно получить, используя следующий прием. Пусть $\psi(x)$ – известная нам волновая функция состояния, имеющего энергию E (например, только что рассмотренная волновая функция основного состояния). Тогда, с точностью до нормировочного множителя, волновой функцией является и $(i\hat{p} - m\omega\hat{x})\psi \equiv (\hbar \frac{\partial}{\partial x} - m\omega x)\psi$.

⁹Зависимость собственной частоты фотонной моды от амплитуды поля определяется *оптической нелинейностью* среды, заполняющей резонатор, и наблюдается при использовании мощных лазерных источников света для резонаторов, содержащих материальные среды (газы, жидкости, твердые тела или плазму). Если же резонатор не заполнен никакой средой, подобную зависимость, связанную с оптической *нелинейностью вакуума*, с использованием современного экспериментального оборудования наблюдать не удастся.

Действительно, подставляя это выражение в уравнение Шредингера и используя коммутационные соотношения $[\hat{x}^2, \hat{p}] = 2i\hbar x$, $[\hat{p}^2, \hat{x}] = -2i\hbar p$, убеждаемся, что полученная таким образом функция действительно является собственной функцией уравнения Шредингера, при этом собственная энергия оказывается равна $E + \hbar\omega$.

К полученной таким образом новой волновой функции можно вновь применить указанный оператор, получить волновую функцию следующего состояния с энергией $E + 2\hbar\omega$, и так далее. Энергия любого из уровней дискретного спектра гармонического осциллятора оказывается равной

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad (3.14)$$

где n – номер уровня (в нашей процедуре – число раз, которое необходимо подействовать на основное состояние оператором $(i\hat{p} - im\omega\hat{x})$, чтобы получить данное).

Выпишем также вид волновых функций нескольких первых уровней¹⁰

$$\begin{aligned} \psi_0 &\propto e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ \psi_1 &\propto (ip + x)\psi_0 \propto xe^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ \psi_2 &\propto (ip + x)\psi_1 \propto \left(\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 - 1\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Недостающие множители в этих выражениях можно найти из условия нормировки волновой функции.

3.8 Термодинамика гармонического осциллятора

Дискретный характер спектра проявляется, среди прочего, в термодинамических свойствах квантовых объектов. Мы уже знакомы с одним из практических следствий этого обстоятельства – излучение нагретых тел не может быть описано в рамках классической физики. Сейчас мы готовы вывести формулу Планка, базируясь на современном аппарате квантовой теории. Сначала мы опишем термодинамические свойства одиночного гармонического осциллятора, а потом перейдем к совокупности осцилляторов с разными собственными частотами – системе, которую и представляет собой газ фотонов.

Итак, рассмотрим гармонический осциллятор с собственной частотой ω , имеющий спектр (3.14), при температуре T . В соответствии с основными положениями статистической механики, вероятность найти систему в каждом из ее состояний зависит от энергии этого состояния E и определяется формулой

$$p_n = Z^{-1} e^{-\frac{E_n}{kT}}, \quad (3.16)$$

где множитель Z определяется из условия равенства единице вероятности обнаружить систему в каком-либо из возможных состояний: $\sum_n p_n = 1$,

¹⁰ Волновая функция произвольного уровня гармонического осциллятора имеет вид $\psi_n = P_n(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$, где P_n – полиномы Эрмита. Полином $P_n(x)$, а с ним и волновая функция n -того уровня, имеет n нулей. Эта ситуация (совпадение числа нулей волновой функции и номера уровня) является общей для всех одномерных систем.

откуда

$$Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{kT}}. \quad (3.17)$$

Величину Z называют *статистической суммой* системы. Для гармонического осциллятора, в соответствии с формулой (3.14),

$$Z = \sum_n e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}(n+\frac{1}{2})}. \quad (3.18)$$

Выражение под знаком суммирования представляет собой члены ряда бесконечной геометрической прогрессии, поэтому суммирование дает

$$Z = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}}}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}, \quad (3.19)$$

и вероятность обнаружить систему в заданном состоянии равна

$$p_n = \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right) e^{-n\frac{\hbar\omega}{kT}}, \quad (3.20)$$

Давайте посмотрим, как ведет себя вероятность обнаружить систему в основном состоянии $p_0 = 1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$ в зависимости от температуры. Пока температура достаточно мала, а именно, при $kT \ll \hbar\omega$, эта вероятность отличается от единицы на экспоненциально малую величину, то есть система почти наверняка находится в основном состоянии. Предваряя дальнейшие расчеты, заметим, что это означает, что в данном режиме средняя энергия системы¹¹ \bar{E} с высокой точностью равна $\frac{\hbar\omega}{2}$ и практически не зависит от температуры. Остальные уровни не дают сколько-нибудь заметного вклада в термодинамику системы (принято говорить про *вымораживание* данной степени свободы). Если же температура сравнима с $\hbar\omega$ или значительно превышает эту величину, величина p_0 существенным образом отличается от единицы, и вклад вышележащих уровней в свойства системы оказывается значительным.

Вычислим среднюю величину энергии

$$\bar{E} = \sum_n E_n p_n = Z^{-1} \sum_n E_n e^{-\frac{E_n}{kT}}. \quad (3.21)$$

Для вычисления суммы в этом выражении проще всего заметить, что она равна $-\frac{\partial Z}{\partial(1/kT)}$ (проверяется почленным дифференцированием определения (3.17)). Подставляя выражение (3.19) для Z , после несложных преобразований находим

$$\bar{E} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (3.22)$$

В пределе низких температур второе слагаемое в этом выражении экспоненциально мало, то есть, в подтверждение ранее сделанного вывода, $\bar{E}(kT \ll \hbar\omega) = \frac{\hbar\omega}{2}$. В противоположном пределе высоких температур разложение экспоненты в ряд Тейлора дает $\bar{E}(kT \gg \hbar\omega) = \frac{\hbar\omega}{2} + kT$.

¹¹Во избежание разночтений со средним по заданному состоянию квантовой системы, мы обозначаем усреднение по температурным флуктуациям чертой.

Полученные формулы следует сравнить с классическим результатом $\overline{E} = kT$ (если вы не помните этой формулы, ее легко получить из принципа соответствия, устремив к нулю постоянную Планка в выражении (3.22)). Видно, что качественных отличий два: во-первых, в квантовом случае энергия отсчитывается не от дна осциллятора, а от энергии основного состояния $\frac{\hbar\omega}{2}$; во-вторых, для квантовых систем присутствует феномен ‘вымораживания’. Именно последнее обстоятельство определяет существенное отличие квантовой теории излучения от классической и позволяет избежать ‘ультрафиолетовой катастрофы’¹².

3.9 Вывод формулы Планка

Вывод формулы Планка основан на представлении о фотонных модах как о совокупности гармонических осцилляторов. Разумеется, никаких фактических колеблющихся частиц определенной массы при этом нет¹³ – колебания совершают величины электрического и магнитного поля¹⁴. По счастью, для определения термодинамики осциллятора совершенно неважно, что именно колеблется, так как для определения спектра и вычисления средней энергии достаточно знать только частоту колебаний. Тот же факт, что речь идет о именно о гармонических осцилляторах, как мы говорили в начале лекции, следует из независимости этой частоты от амплитуды колебаний.

Итак, раз фотонный газ представляет собой набор гармонических осцилляторов, а термодинамика гармонического осциллятора нам известна, надо просто конкретизировать, сколько и каких осцилляторов имеется в заполненном фотонами объеме. Тогда свойства системы в целом, например среднюю энергию, можно будет определить, просуммировав по всем осцилляторам величину средней энергии каждого из них.

Рассмотрим полость в виде куба с ребром L , заполненную фотонным газом, находящимся в термодинамическом равновесии со стенками полости, то есть, имеющим заданную температуру T . Нас будет интересовать разность средней энергии системы и энергии ее основного состояния, то есть, энергия, ‘вкочанная’ в полость из-за нагрева стенок. Для каждой из фотонных мод эта величина определяется формулой

$$\Delta\overline{E}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}, \quad (3.23)$$

где ω – частота моды.

Когда мы ранее говорили о фотонных модах свободного пространства, мы использовали плоские волны $\mathcal{E} \propto e^{i(kr - \omega(k)t)}$, $\omega = ck$ (во избежание путаницы с энергией, в этой лекции мы обозначаем электрическое поле \mathcal{E} каллиграфическим шрифтом). Фотонные моды для полости конечных размеров, разумеется, отличаются от мод свободного пространства (ситуация

¹²Наличие нулевых колебаний фотонных мод также экспериментально значимо. Во-первых, с ними связано появление силы Казимира, описывающей притяжение двух параллельных проводящих поверхностей. Во-вторых, с наличием нулевых колебаний связаны некоторые эффекты *нелинейной оптики*, в частности *спонтанное параметрическое рассеяние* света.

¹³Масса покоя фотона равна нулю, и не имеет никакого отношения к рассматриваемой задаче.

¹⁴Именно эти величины играют роль координаты и импульса осциллятора при описании фотонной моды, если последняя представляет собой стоячую волну в резонаторе.

вполне аналогична различию решений уравнения Шредингера для состояний дискретного и непрерывного спектра). Если полость достаточно велика, нам, впрочем, безразлично, как именно ‘устроены’ стенки – для определения средних достаточно знать только свойства объема полости. Поэтому для вывода формул, определяющих количество фотонных мод, можно использовать любые граничные условия – хотя разные граничные условия соответствуют разным по виду фотонным модам, ответ для вычисляемых средних должен во всех случаях получиться одинаковым.

Проще всего использовать так называемые периодические граничные условия, о которых мы уже говорили раньше. Напомним, что удобство использования периодических граничных условий состоит в том, что в этом случае моды полости имеют такой же вид, как и моды свободного пространства, но *только при определенных значениях волнового вектора k* : периодические граничные условия выполняются, только если $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}\{j_x, j_y, j_z\}$, где $\{j_x, j_y, j_z\}$ – вектор, компонентами которого являются целые числа.

В случае электромагнитного поля, как вы, вероятно, уже знаете из курса электродинамики, каждому набору $\{j_x, j_y, j_z\}$ соответствует две моды, различающихся направлением *поляризации*.

Определим, какое число фотонных мод имеет частоту, лежащую в заданном интервале $\omega_1 \dots \omega_2$. Эта величина, определяется суммой

$$N(\omega_1, \omega_2) = \sum_{\mathbf{k}: \omega_1 < \omega(\mathbf{k}) < \omega_2} 2 \quad (3.24)$$

Здесь суммирование проводится по всем допустимым значениям волнового вектора $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}\{j_x, j_y, j_z\}$ (то есть, фактически, по целочисленным индексам j_x, j_y, j_z), таким, что частота $\omega(k) = ck$ лежит в заданном интервале. Двойка – число возможных ориентаций поляризации. Полагая, что размер полости достаточно велик, перейдем от суммирования к интегрированию

$$N(\omega_1, \omega_2) = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \int_{\mathbf{k}: \omega_1 < \omega(\mathbf{k}) < \omega_2} d^3k. \quad (3.25)$$

Интеграл в этом выражении – это просто объем области интегрирования, представляющей собой шаровой слой. В соответствии с формулой объема шара, он равен $\frac{4\pi}{3}(k_2^3 - k_1^3)$, где $k_{1,2} = \omega_{1,2}/c$. Если разница $\omega_2 - \omega_1$ достаточно мала, эта величина равна площади сферы радиуса k_1 , умноженной на толщину шарового слоя $k_2 - k_1$, что дает

$$N(\omega, \omega + d\omega) = \frac{8\pi\omega^2}{c^3} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 d\omega. \quad (3.26)$$

Запасенная в этих модах средняя тепловая энергия составляет $\Delta\bar{E}(\omega)N(\omega, \omega + d\omega)$. Число мод, отнесенное к объему системы и к величине частотного интервала, принято называть *плотностью состояний* системы. Плотность состояний фотонов в вакууме, таким образом, равна

$$\rho(\omega) = \frac{N(\omega, \omega + d\omega)}{L^3 d\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (3.27)$$

Средняя плотность тепловой энергии в системе на единицу частотного интервала, очевидно, равна

$$\Delta\bar{E}(\omega)\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad (3.28)$$

Формула Планка определяет не плотность энергии, а ее *поток* в направлении от стенки полости. Эти величины связаны простым соотношением. Во-первых, очевидно, что только половина фотонов вблизи интересующей нас стенки испущена ей, поскольку остальная половина летит *на стенку*. Остальная половина движется от стенки со средней скоростью¹⁵ $c/2$. Таким образом, плотность энергии связана с ее потоком коэффициентом $c/4$, и мы приходим к формуле Планка

$$\frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad (3.29)$$

3.10 Понятие о вырождении в системах со сферической симметрией. Трехмерный гармонический осциллятор

Перейдем теперь к состояниям дискретного спектра частицы в трехмерном потенциале, имеющем сферическую симметрию. Уравнение Шредингера для такой задачи имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) + U(r)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (3.30)$$

Символом r обозначено расстояние до начала координат; зависимость потенциала только от r (а не от каждой из компонент радиус-вектора \mathbf{r}) и означает его сферическую симметрию. Оператор Лапласа в декартовых координатах равен сумме квадратов компонент:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

В отличие от рассмотренных нами ранее простейших одномерных моделей, не нужно объяснять, почему такие системы нам интересны – разумеется, прежде всего речь идет об описании электронных оболочек атомов. Говоря про сферически-симметричный потенциал, мы будем иметь в виду прежде всего потенциал кулоновского поля. Как мы увидим в дальнейшем, такая модель годится для описания атомов, содержащих единственный электрон (то есть, водорода и *водородоподобных систем*), но нуждается в модификации для случая многоэлектронных атомов.

Особенностью задач о состояниях дискретного спектра частицы в сферически-симметричной потенциальной яме по сравнению с рассмотренными ранее простыми моделями является так называемое *вырождение уровней* – оказывается, что несколько различных состояний имеют одну и ту же энергию. Это свойство связано с высокой симметрией рассматриваемой задачи¹⁶. Простейшей моделью, позволяющей убедиться в наличии вырождения, является модель сферически-симметричного трехмерного гармониче-

¹⁵Средняя компонента скорости в направлении от стенки получается интегрированием по полусфере радиуса c : $v_z = (2\pi^{-1}) \int c \cos \Theta d^2r = c \int \cos \Theta \sin \Theta d\Theta = c/2$.

¹⁶Для знакомых с теорией групп: вырождение связано с тем, что группа симметрии задачи – не абелева и поэтому ее неприводимые представления не одномерны.

ского осциллятора. Уравнение Шредингера для этой модели имеет вид

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(\mathbf{r}) + \frac{m\omega^2}{2}(r^2)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (3.31)$$

или, в декартовых координатах,

$$\frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m}\psi(x, y, z) + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2 + z^2)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z). \quad (3.32)$$

Несложно убедиться, что переменные разделяются – если представить волновую функцию в виде произведения $\psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$, уравнение Шредингера распадается на 3 независимых уравнения вида

$$\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\psi_x(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi_x(x) = E_x\psi_x(x) \quad (3.33)$$

(и аналогично для y, z). Физически это означает, что систему можно представить как совокупность трех независимых гармонических осцилляторов. Полная энергия есть сумма энергий каждого из этих осцилляторов: $E = E_x + E_y + E_z$. В соответствии с задачей об уровнях одномерного гармонического осциллятора, получаем

$$E = \hbar\omega \left(\frac{3}{2} + n_x + n_y + n_z \right),$$

где неотрицательные целые n_x, n_y, n_z – квантовые числа, определяющие состояние каждого из одномерных осцилляторов.

Несложно убедиться в том, что все уровни, кроме основного (соответствующего $n_x = 0, n_y = 0, n_z = 0$), являются вырожденными. Например, энергия $\frac{5}{2}\hbar\omega$ соответствует трем возможным состояниям с квантовыми числами $n_x = 1, n_y = 0, n_z = 0$, $n_x = 0, n_y = 1, n_z = 0$, и $n_x = 0, n_y = 0, n_z = 1$; уровень с энергией $\frac{7}{2}\hbar\omega$ – шести состояниям (проверьте это самостоятельно), и так далее. Также, можно понять, что вырождение уровней действительно связано с симметрией – уровни ямы с потенциалом $\frac{m\omega_x^2}{2}x^2 + \frac{m\omega_y^2}{2}y^2 + \frac{m\omega_z^2}{2}z^2$ не вырождены, если собственные частоты $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ не совпадают (то есть, если потенциал зависит от каждой из координат по отдельности, а, значит, яма не является сферически-симметричной)¹⁷.

К сожалению, задача о сферическом гармоническом осцилляторе интересна только в иллюстративных целях – многие выводы, которые можно сделать на основе ее анализа, для сферически-симметричного потенциала общего вида оказываются неверными. В частности, нельзя перенести на общий случай результаты для *кратности вырождения* уровней – числа состояний, имеющих одинаковую энергию.

Для анализа общего случая необходимо проанализировать уравнение Шредингера с произвольным потенциалом $U(r)$. Наиболее простой с точки зрения математика способ решения – анализ уравнения Шредингера в сферических координатах. Такой подход изложен практически во всех учебниках по квантовой механике. Однако этот путь требует достаточно продолжительных выкладок, которые могут полностью заслонить физическую суть задачи (особенно для второкурсника). Поэтому мы выберем несколько другой подход.

¹⁷Мы отвлекаемся от случая кратных собственных частот, $\omega_x = 2\omega_y = 3\omega_z$ и т.п.

3.11 Радиальная часть оператора Лапласа

Рассмотрим вначале частный случай состояния, волновая функция которого является сферически-симметричной, то есть зависит только от расстояния до начала координат: $\psi = R(r)$. Вычислим результат действия оператора Лапласа на такую функцию. Учитывая, что $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ и, следовательно, $\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r}$, получаем

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} R(r) &= \frac{x}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r}; \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} R(r) &= \frac{x^2}{r^2} \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \left(\frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3} \right) \frac{\partial R(r)}{\partial r},\end{aligned}$$

и аналогично для производных по y и z . Суммируя выражения для вторых производных, приходим к формуле (проведите эти выкладки самостоятельно!)

$$\Delta R(r) = \frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r}. \quad (3.34)$$

Часто это выражение записывают в виде

$$\Delta R(r) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right). \quad (3.35)$$

Оператор, стоящий в полученных формулах, называют *радиальной частью оператора Лапласа* и обозначают Δ_r .

Найдем выражение для этого оператора в декартовых координатах, подействовав им на функцию $\psi(x, y, z)$. Из выражений для декартовых координат через сферические $x = r \sin \theta \cos \phi$, $y = r \sin \theta \sin \phi$, $z = r \cos \theta$ следует $\frac{\partial x}{\partial r} = \frac{x}{r}$, $\frac{\partial y}{\partial r} = \frac{y}{r}$, $\frac{\partial z}{\partial r} = \frac{z}{r}$. Отсюда находим

$$r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} = r \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} + y \frac{\partial \psi}{\partial y} + z \frac{\partial \psi}{\partial z} \right). \quad (3.36)$$

Учитывая, что $\frac{\partial}{\partial r}(rx) = 2x$ и аналогично для y и z , получаем итоговое выражение для радиальной части:

$$\begin{aligned}\Delta_r &\equiv \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} = \\ &\frac{2}{r^2} \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} + y \frac{\partial \psi}{\partial y} + z \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \frac{1}{r^2} \left(x^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + y^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + z^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + 2xy \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} + 2xz \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial z} + 2yz \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial z} \right)\end{aligned} \quad (3.37)$$

(проверьте: выражение довольно громоздкое, но с простой структурой).

Чтобы не запутаться в формулах, в конце каждого раздела этой главы написано, какие из полученных выражений являются наиболее значимыми.

- Из данного раздела, надо запомнить прежде всего выражение для радиальной части оператора Лапласа (3.35).

3.12 Угловая часть оператора Лапласа. Оператор момента.

Разницу между полным оператором Лапласа и его радиальной частью

$$\Delta_{\theta,\phi} = \Delta - \Delta_r \quad (3.38)$$

называют *угловой частью оператора Лапласа*. Она существенна для работы с волновой функцией, зависящей не только от расстояния до центра, но и от углов. Смысл разделения на радиальную и волновую части состоит в том, что если волновая функция имеет вид произведения $\psi = R(r)Y(\theta, \phi)$, то

$$\Delta\psi = Y(\theta, \phi)\Delta_r R(r) + R(r)\Delta_{\theta,\phi}Y(\theta, \phi), \quad (3.39)$$

то есть две части оператора Лапласа действуют каждая на “свой” сомножитель волновой функции. То, что Δ_r не действует на угловые переменные, видно непосредственно из выражения (3.35). Позже мы установим выражение для $\Delta_{\theta,\phi}$, из которого будет следовать, что этот оператор коммутирует с $R(r)$.

Используя ранее полученное выражение для Δ_r в декартовых координатах и очевидные соотношения вида $r^2 - x^2 = y^2 + z^2$, получаем

$$\begin{aligned} \Delta_{\theta,\phi} = & -\frac{2}{r^2} \left(x \frac{\partial\psi}{\partial x} + y \frac{\partial\psi}{\partial y} + z \frac{\partial\psi}{\partial z} \right) + \\ & \frac{1}{r^2} \left((y^2 + z^2) \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + (x^2 + z^2) \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + (x^2 + y^2) \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} - 2xy \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y} - 2xz \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial z} - 2yz \frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial z} \right). \end{aligned} \quad (3.40)$$

Это выражение можно записать в значительно более компактной и “физичной” форме, если использовать выражение для оператора момента импульса. В классической механике момент импульса определяется как векторное произведение $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Соответствующий оператор в квантовой теории, в соответствии с общим правилом, получается заменой координаты и импульса на соответствующие операторы. Размерность момента импульса – действие, то есть такая же, как у постоянной Планка. Поэтому в принято измерять эту величину в единицах \hbar и использовать безразмерный оператор момента:

$$\hat{\mathbf{l}} = -i\mathbf{r} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}. \quad (3.41)$$

В декартовых координатах

$$\hat{l}_x = -i \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right); \quad \hat{l}_y = -i \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right); \quad \hat{l}_z = -i \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (3.42)$$

Рассмотрим выражение для квадрата одной из компонент момента:

$$\hat{l}_x^2 = - \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right). \quad (3.43)$$

Учитывая, что $\frac{\partial}{\partial y}y = 1 + y \frac{\partial}{\partial y}$, $\frac{\partial}{\partial z}z = 1 + z \frac{\partial}{\partial z}$, получаем (вновь, воспроизведите выкладки самостоятельно!)

$$\hat{l}_x^2 = - \left(y^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - 2yz \frac{\partial^2}{\partial y\partial z} - y \frac{\partial}{\partial y} - z \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (3.44)$$

Полностью аналогично для двух других компонент можно получить

$$\hat{l}_y^2 = - \left(z^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2zx \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} - z \frac{\partial}{\partial z} - x \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (3.45)$$

$$\hat{l}_z^2 = - \left(x^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + y^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - x \frac{\partial}{\partial x} - y \frac{\partial}{\partial y} \right). \quad (3.46)$$

Теперь, сравним эти выражения с формулой для угловой части оператора Лапласа (3.40). Несложно убедиться, что

$$\Delta_{\theta, \phi} = - \frac{\hat{l}^2}{r^2}, \quad (3.47)$$

где квадрат оператора углового момента есть сумма квадратов его компонент, $\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$. Это и есть искомая формула. Уравнение Шредингера теперь можно записать в виде

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \psi + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\hat{l}^2}{r^2} \psi + U(r) \psi = E \psi. \quad (3.48)$$

Полученное нами слагаемое $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\hat{l}^2}{r^2}$ представляет собой *центробежную энергию*. Совершенно аналогичная величина появляется и в классической задаче о движении в центральном поле.

- Ключевыми моментами данного раздела являются определение оператора момента (3.41) и итоговый вид уравнения Шредингера.

3.13 Свойства компонент оператора момента

Поговорим о свойствах операторов для различных компонент момента импульса подробнее. Прежде всего, установим коммутационные соотношения:

$$[l_x, l_y] = il_z, \quad [l_y, l_z] = il_x, \quad [l_z, l_x] = il_y. \quad (3.49)$$

Эти соотношения легко получить, воспользовавшись формулами (3.42). С их помощью можно получить выражения для более сложных коммутаторов. В частности, (освежите свои навыки вычисления коммутаторов!)

$$[l_z, l_x^2] = i(l_y l_x + l_x l_y), \quad (3.50)$$

и аналогично

$$[l_z, l_y^2] = -i(l_y l_x + l_x l_y). \quad (3.51)$$

Поскольку коммутатор оператора с ним самим равен нулю, легко понять, что

$$[l_z, l_z^2] = 0. \quad (3.52)$$

Суммируя три полученных равенства, приходим к важному выводу о том, что оператор проекции момента коммутирует с оператором квадрата момента:

$$[l_z, l^2] = 0. \quad (3.53)$$

(естественно, такие же соотношения можно установить и для двух других проекций).

Наконец, прямой подстановкой можно убедиться в том, что операторы проекций коммутируют с любой функцией r

$$[l_z, f(r)] = 0. \quad (3.54)$$

и квадратом оператора импульса

$$[l_z, p^2] = 0. \quad (3.55)$$

Последние два равенства означают, в частности, что для систем с центрально-симметричным потенциалом операторы проекций момента (а также, любые их функции, в частности оператор квадрата момента) коммутируют с гамильтонианом:

$$[l_z, H] = 0, \quad [l^2, H] = 0. \quad (3.56)$$

Обращение в нуль коммутаторов очень важно ввиду следующей теоремы: *Если коммутатор нескольких операторов равен нулю, эти операторы имеют общую систему собственных функций*, то есть если $[\hat{a}\hat{b}] = 0$, то можно¹⁸ выбрать собственные функции \hat{a} таким образом, что они будут являться одновременно и собственными функциями \hat{b} .

Сказанное применительно к системам со сферической симметрией означает, что в силу (3.53, 3.56) *существует система собственных функций гамильтониана, которые являются одновременно собственными функциями квадрата орбитального момента и одной из проекций момента*. Обычно в качестве такой проекции выбирают проекцию на ось z (поскольку, как показывает (3.49), операторы проекций на разные оси друг с другом не коммутируют, такие функции уже *не являются* собственными функциями l_x, l_y).

Имеет смысл сначала найти общие собственные функции l^2 и l_z , а уже затем переходить к вопросу об определении собственных функций H .

Оператор l_z в сферических координатах принимает очень простой вид

$$l_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (3.57)$$

Убедиться в справедливости этого выражения можно, подействовав этим оператором на $\psi(r \cos \phi \sin \theta, r \sin \phi \sin \theta, r \cos \theta)$ и сравнив результат с (3.42). Собственные функции l_z , очевидно, имеют вид

$$\psi = f(r, \theta) e^{im\phi}, \quad (3.58)$$

¹⁸Приведем доказательство этой теоремы для двух операторов \hat{a}, \hat{b} , действующих в конечномерном пространстве. Покажем, что можно выбрать базис, являющийся собственным для обоих операторов (собственный базис – базис, в котором ортами являются собственные вектора оператора; легко проверить, что в собственном базисе оператор диагонален, и диагональные матричные элементы есть его собственные значения). Выберем какой-либо собственный базис \hat{a} . В этом базисе матричные элементы коммутатора равны $a_{ii}b_{ij} - b_{ij}a_{jj}$, то есть равенство коммутатора нулю означает $b_{ij}(a_{ii} - a_{jj}) = 0$. Если собственные значения a не вырождены ($a_{ii} \neq a_{jj}$ при $i \neq j$), мы сразу получаем $b_{ij} = 0$, что и требовалось. Если же среди собственных значений \hat{a} встречаются совпадающие, диагонализировать \hat{b} всегда можно посредством ортогональных вращений в каждом из подпространств, отвечающих совпадающим собственным значениям – матрица оператора \hat{a} при таких вращениях неизменна.

где собственное значение m – целое число.

Выражения для двух других проекций в сферических координатах нам не понадобятся. Отметим только, что они получаются из формулы для l_z поворотом системы координат и поэтому включают углы θ, ϕ , но не величину r . Соответственно, эти операторы действуют только на угловую часть волновой функции вида $R(r)Y(\theta, \phi)$, и общие собственные функции l^2 и l_z следует искать в виде

$$\psi = R(r)f(\theta)e^{im\phi}. \quad (3.59)$$

Мы не будем искать $f(\theta)$ в явном виде, а определим спектр l^2 и l_z , исходя из известных нам коммутационных соотношений. Введем в рассмотрение операторы

$$l_+ = (l_x + il_y), \quad l_- = (l_x - il_y). \quad (3.60)$$

Используя (3.49), легко установить равенство

$$l_{\pm}l_{\mp} = l^2 - l_z^2 \pm l_z \quad (3.61)$$

и коммутационные соотношения

$$[l_z, l_{\pm}] = \pm l_{\pm}, \quad [l^2, l_{\pm}] = 0. \quad (3.62)$$

Эти же соотношения можно переписать как

$$\begin{aligned} l_z l_{\pm} &= l_{\pm}(l_z \pm 1) \\ l^2 l_{\pm} &= l_{\pm} l^2. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Рассмотрим какую-нибудь нормированную собственную функцию операторов l^2 и l_z , отвечающую собственным значениям λ_l, m :

$$\begin{aligned} l_z |l, m\rangle &= m |l, m\rangle, \\ l^2 |l, m\rangle &= \lambda_l |l, m\rangle \end{aligned} \quad (3.64)$$

(здесь l – некоторое квантовое число¹⁹, нумерующее собственные значения l^2). Подействуем на $|l, m\rangle$ выписанными операторами

$$\begin{aligned} l_z l_{\pm} |l, m\rangle &= l_{\pm}(l_z \pm 1) |l, m\rangle \\ l^2 l_{\pm} |l, m\rangle &= l_{\pm} l^2 |l, m\rangle. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Комбинируя выписанные выражения, получаем

$$\begin{aligned} l_z (l_{\pm} |l, m\rangle) &= (m \pm 1) (l_{\pm} |l, m\rangle) \\ l^2 (l_{\pm} |l, m\rangle) &= \lambda_l (l_{\pm} |l, m\rangle). \end{aligned} \quad (3.66)$$

Таким образом, операторы l_{\pm} переводят одни собственные функции l^2 и l_z в другие, при этом собственные значения оператора l^2 остаются неизменными, а собственные значения оператора l_z – меняются на единицу. Это можно записать в виде равенства

$$l_{\pm} |l, m\rangle = C |l, m \pm 1\rangle, \quad (3.67)$$

¹⁹ Путаницы l с оператором момента не должно возникнуть, поскольку l не имеет индексов и не возводится в степени.

где C – коэффициент, обеспечивающий нормировку $\langle l, m \pm 1 | l, m \pm 1 \rangle = 1$, то есть

$$\langle l, m | (l_{\pm})^{\dagger} l_{\pm} | l, m \rangle = C^2. \quad (3.68)$$

Здесь $(l_{\pm})^{\dagger}$ означает эрмитово-сопряженный оператор²⁰. Поскольку $(l_{\pm})^{\dagger} = l_{\mp}$, учитывая (3.61), получаем

$$C^2 = \langle l, m | l_{\mp} l_{\pm} | l, m \rangle = \langle l, m | l^2 - l_z^2 \mp l_z | l, m \rangle = \lambda_l - m^2 \mp m, \quad (3.69)$$

то есть

$$l_{\pm} | l, m \rangle = \sqrt{\lambda_l - m^2 \mp m} | l, m \pm 1 \rangle. \quad (3.70)$$

Таким образом, стартовав с какой-то собственной функции l^2 и l_z , мы можем получить целый набор, различающийся значениями m . Напомним, m должно быть целым числом. С другой стороны, ясно, что при заданном l величина m не может быть произвольно большим по модулю – для заданной величины квадрата полного момента нельзя ожидать сколь угодно больших значений его проекции. Это может означать только одно – при многократном действии, например, оператора l_+ нормировочный множитель в какой-то момент обращается в нуль, так что дальнейшее увеличение m становится невозможно. Тогда условие зануления нормировочного множителя означает $\lambda_l = m_{max}(m_{max} + 1)$. Таким образом, собственное значение l^2 однозначно связано с максимальным в данном наборе собственным значением m . Фактически, это максимальное значение и есть квантовое число, нумерующее собственные значения l^2 : $m_{max} \equiv l$, и

$$\lambda_l = l(l + 1). \quad (3.71)$$

Сразу видно, что минимально достижимое значение m равно $-l$, а число возможных значений составляет $2l + 1$.

Часто для краткости говорят не о “состоянии с определенным значением квадрата момента, равным $l(l + 1)$ ”, а просто о “состоянии с моментом l ”.

Резюмируем полученные результаты:

- Операторы l^2 и l_z действуют только на угловые переменные, с функциями r они коммутируют.
- Существует общий собственный базис операторов H , l^2 и l_z .
- Собственные значения оператора l^2 равны $l(l + 1)$, где l – целое неотрицательное число.
- Собственные значения l_z вырождены – каждому из них соответствует $2l + 1$ собственных функций, различающихся собственными значениями l_z . Эти собственные значения равны $m = -l, -l + 1, \dots, l$.

Следует подчеркнуть, что полученные до настоящего момента результаты являются общими для всех систем со сферической симметрией и не связаны с конкретным видом потенциала $U(r)$. Но, разумеется, поиск собственных значений оператора Гамильтона уже требует конкретизации вида потенциала. Однако, проделанная работа не напрасна – поскольку мы ищем общий базис операторов H , l^2 и l_z , знание спектра операторов l^2 и l_z существенно упрощает задачу.

²⁰В более привычной второкурснику нотации линейной алгебры, вычисляется норма вида $\langle Ax, Ax \rangle$, где A – матрица, x – вектор. Эта норма равна $\langle x, A^*Ax \rangle$.

3.14 Уравнение для радиальной части волновой функции и классификация состояний

Вернемся к уравнению Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\psi + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\hat{l}^2}{r^2}\psi + U(r)\psi = E\psi. \quad (3.72)$$

Искомая собственная функция H есть одновременно собственная функция \hat{l}^2 , то есть $\hat{l}^2\psi = l(l+1)\psi$. После такой замены, очевидно, угловые переменные выпадают из уравнений, и поиск волновой функции в виде $\psi = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ приводит к уравнению для радиальной части

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r R(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}R(r) + U(r)R(r) = ER(r). \quad (3.73)$$

Заменой $R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$ это уравнение приводится к уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi(r)}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\chi(r) + U(r)\chi(r) = E\chi(r), \quad (3.74)$$

по форме совпадающим с уравнением Шредингера для одномерного движения в потенциале, включающим поле $U(r)$ и центробежный потенциал $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\chi(r)$. Для состояний с нулевым значением момента центробежный потенциал отсутствует.

Основное отличие от задачи об одномерном движении состоит в том, что функции $R(r)$ и $\chi(r)$ определены только на полуоси $r > 0$.

Нормировать волновую функцию следует условием $\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = 1$, то есть $\int_0^\infty |\chi|^2 dr = 1$.

Введем квантовое число n_r , нумерующее решения уравнения для радиальной части и пробегающее значения $0, 1, 2, \dots$. Тогда, очевидно, для полного определения волновой функции $\psi = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ необходимо знать три квантовых числа: n_r, l, m . По причинам, которые скоро будут ясны, при классификации уровней гамильтониана вместо n_r принято использовать *главное квантовое число*

$$n = n_r + l + 1.$$

Очевидно, n принимает значения $n = 1, 2, 3, \dots$. Собственные состояния системы можно обозначить как $|n, l, m\rangle$.

Собственные значения (энергии уровней) зависят только от двух квантовых чисел: $E = E(n, l)$; по числу m уровни $2l + 1$ -кратно вырождены. Общепринятым является обозначение уровней цифрой, соответствующей главному квантовому числу, и латинской буквой, определяющей значение момента согласно таблице:

$$\begin{array}{cccccc} l = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & \dots \\ & & s & p & d & f & g & \dots \end{array}$$

Так, например, $3p$ означает состояние с $n = 3, l = 1$ и, следовательно, $n_r = 1$. Поскольку $n_r \geq 0$, величина l не может быть больше $n - 1$.

- Весь материал этого короткого раздела важен.

Дополнительный материал и задачи для семинарских занятий

3.А Одномерное движение

Задачи.

1. Найти вероятность отражения частицы от потенциальной стенки

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0 > 0, & x > 0 \end{cases}$$

Решение. Запишем решение стационарного УШ отдельно в областях $x < 0$ и $x > 0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{iqx} + De^{-iqx}, & x > 0 \end{cases},$$

где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $q = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar$. Для нахождения связи между коэффициентами A и B , и C и D необходимо использовать граничные условия: ВФ и ее первая производная в точках скачка потенциала должны быть непрерывны.

Кроме того, коэффициент $D = 0$. Этому есть два объяснения. Во-первых, в случае $E < U_0$ q - мнимое, и ВФ De^{-iqx} неограниченно возрастает с ростом x . Во-вторых, движение частицы из минус бесконечности слева направо описывается ВФ Ae^{ikx} .

При достижении стенки она может отра-

зиться или продолжать двигаться дальше. Однако ВФ De^{-iqx} описывает частицу, приближающуюся к стенке из плюс бесконечности - поэтому ей просто неоткуда взяться в нашей задаче. Граничные условия дают нам соотношения между коэффициентами A , B и C :
$$\begin{cases} A + B = C \\ ik(A - B) = iqC \end{cases}$$
 Отсюда

получаем $\frac{C}{A} = \frac{2k}{k+q}$ и $\frac{B}{A} = \frac{k-q}{k+q}$. В случае если $E > U_0$, мы можем найти коэффициент отражения $R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left| \frac{k-q}{k+q} \right|^2$. В обратном случае $E < U_0$ q - мнимая величина, а ВФ при $x > 0$ - экспоненциально затухающая функция. Поэтому в этом случае $R = 1$, однако, в отличие от классической механики, существует ненулевая вероятность обнаружить частицу при положительных значениях x .

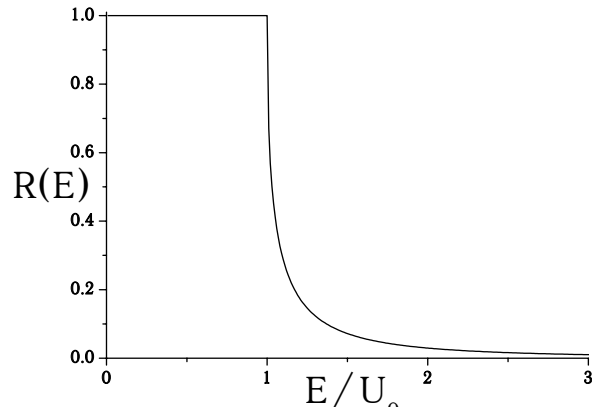


Рис. 3.2: Вид зависимости вероятности отражения частицы от потенциальной стенки от ее энергии.

2. Найти величину скачка производной ВФ на потенциале $U(x) = W\delta(x)$.

Решение: интегрируя уравнение Шредингера в малой окрестности δ -функции, получаем $\psi'(0+) - \psi'(0-) = \frac{2mW}{\hbar^2}\psi(0)$. Отметим, что сама ВФ остается непрерывной.

3. Найти коэффициент прохождения частицы через δ -барьер $U(x) = W\delta(x)$.

4. Найти спектр энергии частицы, находящейся в асимметричной потенциальной яме

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ -U_0 < 0, & 0 < x < d \\ 0, & x > d \end{cases}$$

5. Определить положение уровня энергии частицы в δ -яме $U(x) = -W\delta(x)$.

Решение. ВФ имеет вид: $\psi(x) = \begin{cases} Ae^{qx}, & x < 0 \\ Be^{-qx}, & x > 0 \end{cases}$, $q = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$. Запи-

сывая граничные условия, получаем $A = B$, $2q = 2mW/\hbar^2$, откуда $E = mW^2/2\hbar^2$.

6. Найти дискретный спектр энергии частицы в двойной дельта-яме $U(x) = -W(\delta(x) + \delta(x-d))$.

7. Найти спектр энергии в потенциале гармонического осциллятора $U(\hat{x}) = m\omega^2\hat{x}^2/2$.

Решение. Введем новые операторы $\hat{a} = \frac{(m\omega\hat{x} + i\hat{p})}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$; $\hat{a}^+ = \frac{(m\omega\hat{x} - i\hat{p})}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$. Коммутатор $[\hat{a}\hat{a}^+] = 1$. Выражая операторы координаты и импульса через новые операторы, получаем $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + 1/2)$. Допустим, мы знаем некую СФ этого оператора $\hat{H}|\psi_\varepsilon\rangle = \hbar\omega\varepsilon|\psi_\varepsilon\rangle$. Тогда $\hat{a}^+\hat{H}|\psi_\varepsilon\rangle = (\hat{H} - \hbar\omega)\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle = \hbar\omega\varepsilon\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle$, т.е. $\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle = q|\psi_{\varepsilon+1}\rangle$ - тоже СФ оператора энергии с СЗ $\hbar\omega(\varepsilon+1)$. Из условия нормировки

$$|q|^2 = \langle q\psi_{\varepsilon+1}|q\psi_{\varepsilon+1}\rangle = \langle \psi_\varepsilon|\hat{a}\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle = \langle \psi_\varepsilon|\hat{H}/\hbar\omega + 1/2|\psi_\varepsilon\rangle = \varepsilon + 1/2$$

Отсюда $\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle = \sqrt{\varepsilon + 1/2}|\psi_{\varepsilon+1}\rangle$ и, аналогично, $\hat{a}|\psi_\varepsilon\rangle = \sqrt{\varepsilon - 1/2}|\psi_{\varepsilon-1}\rangle$. Таким образом, операторы \hat{a}^+ и \hat{a} позволяют найти бесконечную последовательность СФ оператора энергии с равномерным (эквидистантным) спектром СЗ, поэтому операторы \hat{a}^+ и \hat{a} называют операторами рождения и уничтожения. Однако СЗ оператора энергии должны быть ограничены снизу. Действительно, $\langle \psi|\hat{a}^+\hat{a}|\psi\rangle = \langle \hat{a}\psi|\hat{a}\psi\rangle = |\hat{a}\psi|^2 \geq 0$, т.е. $\varepsilon \geq 1/2$. Чтобы оборвать бесконечную последовательность СЗ, в нижнем состоянии должно быть $\varepsilon = 1/2$ (тогда $\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$), т.е. энергетический спектр гармонического осциллятора имеет вид $E = \hbar\omega(n + 1/2)$.

8. Выразив оператор \hat{x} через операторы рождения и уничтожения, найти среднее значение квадрата координаты $\langle \hat{x}^2 \rangle$ в n -ом собственном состоянии гармонического осциллятора.

3.В Движение в центральном поле

Задачи.

1. Найти коммутатор $[\hat{j}_x^2, \hat{j}_z^2]$

2. Определить дискретный спектр энергии при движении частицы с моментом $L = 0$ в сферической прямоугольной потенциальной яме

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < d \\ 0, & r > d \end{cases}$$

3. Найти спектр энергии атома водорода.

Решение. Трехмерное стационарное УШ, описывающее движение электрона в центральном поле, в сферических координатах имеет вид

$$\frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\hat{M}^2}{\hbar^2} \psi \right] + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) \psi = 0,$$

в котором угловая часть лапласиана заменена оператором квадрата момента. Представляя ВФ в виде $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{L,m}(\theta, \varphi)$, где $Y_{L,m}(\theta, \varphi)$ - СФ оператора квадрата момента, можно свести задачу к одномерной:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) - \frac{L(L+1)}{r^2} \right\} R = 0.$$

Замена $R(r) = r^{-1} \chi(r)$ позволяет свести полученное уравнение к УШ с дополнительным "центробежным" потенциалом:

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) - \frac{L(L+1)}{r^2} \right\} \chi = 0.$$

При этом вероятность обнаружения частицы при $r \rightarrow 0$ не может стремиться к бесконечности, откуда следует граничное условие $\chi(0) = 0$. Найдем асимптотики решения при $r \rightarrow 0$ и при $r \rightarrow \infty$. Если $U(r)$ растет в нуле не быстрее, чем r^{-2} , то при $r \rightarrow 0$ имеем

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} - \frac{L(L+1)}{r^2} \chi = 0,$$

откуда $\chi \sim r^s$, где $s = -L; L+1$. Очевидно, $\chi \sim r^{L+1}$. При $r \rightarrow \infty$ получаем

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \chi = 0.$$

Нас интересует ограниченное движение частицы, которое возможно при $E < 0$. Обозначая $k = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$, получаем $\chi \sim e^{-kr}$. Сделаем замену $\chi(r) = e^{-kr} f(r)$:

$$f'' - 2kf' - \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} U(r) + \frac{L(L+1)}{r^2} \right\} f = 0.$$

Кулоновский потенциал для атома водорода можно записать в виде

$$\frac{2m}{\hbar^2} U(r) = -\frac{2me^2}{\hbar^2 r} = -\frac{2}{a_0 r}.$$

Тогда, если искать решение уравнения в виде ряда $f = \sum b_n r^n$, то для коэффициентов ряда получаем рекуррентное соотношение $b_{n+1} \{n(n+1) - L(L+1) - \frac{2}{a_0 r}\} = 0$.

$1)\} = 2b_n\{kn - a_0^{-1}\}$. Снизу ряд обрывается при $n = L$, обеспечивая уже полученную асимптотику решения при $r \rightarrow 0$. При больших n коэффициенты ряда убывают как $\frac{b_{n+1}}{b_n} = \frac{2k}{n}$, т.е. ряд ведет себя как $\sum \frac{1}{n!} (2kr)^n \sim e^{2kr}$. Это означает, что решение при $r \rightarrow \infty$ будет расходящимся, если не оборвется при каком-то $n > L$ в случае выполнения условия $nka_0 = 1$. Отсюда получаем спектр энергии для атома водорода. $E = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{Ry}{n^2}$, $Ry = 13.6$ эВ.

4. Найти среднее и наиболее вероятное расстояние от электрона в 2s состоянии до ядра в атоме водорода.

Глава 4

Системы многих частиц. Строение материи

4.1 Спектр атома водорода

Основываясь на результатах прошлой главы, рассмотрим задачу о состояниях частицы в кулоновском потенциале: $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$. Числитель Ze^2 соответствует движению электрона в поле ядра с зарядом Ze . Самой распространенной во Вселенной системой рассматриваемого вида является атом водорода. В этом случае речь идет о связанных состояниях электрона в кулоновском поле ядра, состоящего из единственного протона (то есть, $Z = 1$)¹.

Уравнение для радиальной функции:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi(r)}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \chi(r) - \frac{Ze^2}{r} \chi(r) = E \chi(r), \quad (4.1)$$

Можно обезразмерить переменные, сделав замену $r \rightarrow r_0 r$, $E \rightarrow E_0 E$, где $r_0 = \frac{\hbar^2}{mZe^2}$, $E_0 = \frac{mZ^2 e^4}{\hbar^2}$. Для $Z = 1$ такая замена, разумеется, просто соответствует переходу к атомной системе единиц. Обезразмеренное уравнение имеет вид

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi(r)}{\partial r^2} + \frac{1}{2} \frac{l(l+1)}{r^2} \chi(r) - \frac{1}{r} \chi(r) = E \chi(r). \quad (4.2)$$

Это уравнение допускает точное решение, которое мы приводить не будем². Сразу запишем результат для собственных значений:

$$E = -\frac{mZ^2 e^4}{\hbar^2} \frac{1}{2(n_r + l + 1)^2} = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (4.3)$$

(здесь мы вернулись к размерным переменным).

Видно, что *энергия уровней атома водорода определяется только главным квантовым числом*, а не n_r и l по отдельности (разумеется, поэтому и принято пользоваться n , а не n_r). Как мы вскоре убедимся, это обстоятельство является специфической особенностью кулоновского потенциала (принято говорить о *случайном вырождении* уровней). А вот вырождение по третьему квантовому числу – проекции момента m – как мы уже знаем, является общим свойством всех сферически-симметричных систем; при заданном значении орбитального квантового числа l величина m пробегает $2l + 1$ значение $-l, \dots, l$.

Основное состояние системы – электрон на уровне $1s$. Электрон, оказавшийся на одном из возбужденных уровней, может перейти в нижележащее состояние, испустив фотон. Энергия фотона определяется законом сохранения $\hbar\omega = E_{n'} - E_n$ (n' и n – главные квантовые числа, соответственно, до и после перехода). Возможен и обратный процесс – переход в вышележащее состояние с поглощением фотона, прилетевшего извне.

¹В использованном приближении масса протона считается бесконечной. Относительная погрешность такого приближения $\delta \approx m/m_p \approx 5 \cdot 10^{-4}$. Эта величина, малая по общефизическим стандартам, существенно больше погрешностей спектроскопических измерений (в настоящее время рекордные значения $\delta \approx 10^{-12}$. Более точная модель, учитывающая движение ядра, дает результат, отличающийся от (1) заменой m на $mm_p/(m + m_p)$ [кстати, это ниже делается]. Относительная погрешность такого приближения $\delta \approx 1.3 \cdot 10^{-5}$ (для $n = 1$).

²Для интересующихся отметим, что решение надо искать в виде $\chi_{n_r, l}(R) = r^{l-1} P(r) e^{\lambda r}$, где $P(r)$ – многочлен порядка n_r .

Об оптических переходах мы будем подробнее говорить ближе к концу курса. Сейчас примите на веру, что фактически в атомах переходы происходят не между произвольными уровнями, а только между состояниями, удовлетворяющими определенным *правилам отбора*. В первую очередь, реализуются переходы, при которых значение углового момента меняются на 1 – переходы из p состояний в s , из s в p , из d в p , и так далее.

Частоты переходов образуют *серии*, различающиеся величиной главного квантового числа после перехода. Переходы в пределах каждой из серий соответствуют различным значениям главного квантового числа n' в исходном состоянии

$$\hbar\omega = \frac{me^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right). \quad (4.4)$$

Наибольшее значения имеют две серии, названные по именам открывших их ученых - серия Лаймана (Т. Луман, 1914) и серия Бальмера (J. Balmer, 1885). Серия Лаймана соответствует переходам в основное состояние атома водорода, $n = 1$. Эти линии принято обозначать прописной буквой L, снабженной индексом, указывающим, из какого состояния произошел переход: L_α отвечает переходу из состояния с $n' = 2$, L_β – из состояния с $n' = 3$, и т.д. Линии этой серии лежат в ультрафиолетовой области; переход L_α соответствует длине волны 122 нм. Серия Бальмера соответствует переходом в состояние с $n = 2$. Линии обозначаются как H_α (переход из состояния с $n' = 3$), H_β (из $n' = 4$) и т.д. Четыре первые линии находятся в видимом диапазоне (H_α соответствует длине волны 657 нм, что глаз видит как красный свет), остальные – в ближнем ультрафиолетовом. Прочие серии, соответствующие переходам в состояния $n = 3, 4, \dots$, находятся в инфракрасном диапазоне.

4.2 Другие водородоподобные системы

Атом водорода является не единственной системой, спектр которой описывается рассмотренными формулами. Фактически, спектром рассмотренного типа обладают все системы, состоящие из двух связанных кулоновскими силами частиц с зарядами e_1, e_2 и массами m_1, m_2 . При этом, вместо e^4 в формуле для уровней энергии следует подставить $e_1^2 e_2^2$, а вместо массы – приведенную массу $\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$.

Разумеется, водородоподобный спектр показывают изотопы водорода – дейтерий и тритий. Ядра этих элементов помимо протона включают, соответственно, один или два нейтрона. Небольшое количественное отличие от атома водорода возникает из-за другого значения приведенной массы. Соответствующий сдвиг спектральных линий принято называть *изотопическим сдвигом*.

Водородоподобной системой является ион гелия. Нейтральный атом гелия содержит два электрона и водородоподобной системой не является. Однако, если один из этих электронов удалить, оставшаяся система – ядро из двух протонов и двух нейтронов, с единственным электроном, вполне аналогична атому водорода. Величины энергий переходов, впрочем, в четыре раза больше, чем для водорода, поскольку в два раза больше заряд ядра.

Другой известной системой с водородоподобным спектром является атом *позитрония*. Как известно, каждой элементарной частице соответствует ан-

тичастица, обладающая теми же свойствами, но имеющая противоположный по знаку заряд. Соответствующая электрону античастица называется позитроном. Позитроний представляет собой связанное состояние электрона и позитрона. Приведенная масса в этом случае, как легко понять, равна половине массы электрона. Позитроний нестабилен – электрон и позитрон могут *аннигилировать*, то есть взаимоуничтожиться с испусканием нескольких γ -квантов.

В ядерной физике известен еще ряд водородоподобных систем. Все они нестабильны, поскольку образованы короткоживущими частицами.

Наконец, водородоподобные образования встречаются и в твердотельных системах. В полупроводниках, как известно, существует два типа носителей заряда – электроны и дырки, имеющие противоположные по знаку заряды. Они могут объединяться в связанные водородоподобные образования, которые называют экситонами.

4.3 Спин электрона. Принцип Паули

Перейдем теперь к вопросу о строении электронных оболочек атомов, содержащих более одного электрона. Для этого нам потребуется ввести в рассмотрение понятие *спина* и *принцип Паули*.

Вернемся к вопросу о значениях проекции момента на заданную ось. Поскольку механическому моменту заряженной частицы всегда сопутствует магнитный момент, естественно рассмотреть эксперимент по определению магнитного момента атомов. Первый такой эксперимент был поставлен в 1922 году Штерном (O.Stern) и Герлахом (W. Gerlach). В опыте Штерна и Герлаха пучок атомов серебра пролетал через область неоднородного в пространстве магнитного поля. В этих условиях атомы отклонялись на угол, пропорциональный величине проекции их магнитного момента на направление поля. Прежде всего, эксперимент показал, что эта величина действительно квантуется – пучок распался на два, что означало наличие двух возможных значений проекции момента. Однако, ясно, что полученный результат не имеет прямого отношения к орбитальному движению электронов – число возможных проекций для орбитального движения равно $2l + 1$, то есть является нечетным! Более того, полный орбитальный момент электронов атома серебра равен нулю, то есть, если бы речь шла об орбитальном моменте, расщепления не происходило бы вовсе.

Расщепление пучка в опыте Штерна и Герлаха было связано с наличием у электронов *собственного момента*. В классической картине такой собственный момент соответствовал бы вращению электрона вокруг своей оси. Необходимо оговориться, что в действительности никакого вращения вокруг своей оси не происходит, этот образ приведен только для наглядности. Электрон нельзя ни “раскрутить”, ни “остановить”, величина его собственного момента импульса неизменна и составляет $\hbar/2$. Уже того факта, что момент импульса не кратен постоянной Планка, достаточно, чтобы понять, что ни о каком вращении речь не идет – в этом случае, как и для орбитального движения, момент импульса составлял бы одну или несколько постоянных Планка. Собственный момент элементарных частиц, который принято называть *спином* – это их внутренняя характеристика, не имеющая классического аналога. Можно считать, что, кроме координаты \mathbf{r} , частица

имеет еще одну степень свободы s , так что ее волновая функция зависит от двух переменных

$$\psi = \psi(\mathbf{r}, \mathbf{s}). \quad (4.5)$$

Спин, как и орбитальный момент, принято мерять в единицах постоянной Планка. Таким образом, спин электрона $s = 1/2$. Число его возможных проекций на заданную ось $2s + 1 = 2$, что и объясняет результат опыта Штерна-Герлаха.

Влияние спина на орбитальное движение электрона невелико и определяется релятивистскими квантовыми эффектами, анализ которых выходит за пределы нашего курса. Ограничимся несколькими словами о наблюдаемых следствиях этого влияния. Спиновая и орбитальная степень свободы электрона оказываются связанными (принято говорить о *спин-орбитальном взаимодействии*), так что каждый из уровней энергии, вычисленных для “бесспиновых” электронов, в действительности расщепляется на близкорасположенные уровни³ (за исключением s -уровней, для которых орбитальный момент равен нулю, и расщепления не происходит). Соответственно, расщепленными оказываются и линии спектров атомов. Малость величины расщепления определяется малой величиной релятивистских эффектов в атоме, то есть, в безразмерных величинах, постоянной тонкой структуры $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ (величина расщепления пропорциональна α^2). Описанное расщепление принято называть *тонкой структурой спектров*, что и дало название величине α .

Спин – характеристика, имеющаяся не только у электронов, но и других известных физикам частиц. Экспериментально установлено, что в природе встречаются только частицы, спин которых является целым или полуцелым числом (соответственно, внутренний момент составляет $n\hbar$ или $(n + \frac{1}{2})\hbar$, где n – неотрицательное целое число). Частицы с целым спином называют *бозонами*, а с полуцелым – *фермионами*. В соответствии со сказанным выше, электроны являются фермионами. Оказывается, что бозоны и фермионы ведут себя совершенно по-разному с точки зрения *статистики ансамблей тождественных частиц*, то есть с точки зрения свойств систем, содержащих одинаковые частицы. О статистике тождественных частиц мы поговорим позднее, а пока отметим только главную отличительную черту ансамблей фермионов:

- Два фермиона не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии.

Это утверждение носит название *принципа Паули*. К принципу Паули следует относиться как к аксиоме; его нельзя установить, например, из уравнения Шредингера путем математических выкладок. На более высоких уровнях понимания квантовой теории принцип Паули может быть сформулирован по-другому⁴, но в любом случае речь идет о некотором вводимом в теорию априорном требовании.

Применительно к нашему описанию электронов в атоме, принцип Паули означает, что два электрона не могут иметь одновременно один и тот же

³Вырождение при этом снимается не полностью, то есть каждая из групп уровней, имеющих совпадающую энергию, распадается на несколько групп, состоящих из меньшего числа уровней.

⁴В частности, как требование антисимметрии волновой функции нескольких фермионов по перестановкам.

набор квантовых чисел n, l, m и одну и ту же проекцию величины спина на заданную ось. Поскольку возможных проекций всего две, в состоянии с заданным набором n, l, m может находиться не более чем два электрона.

Обычно, в качестве “заданной оси” выбирают ось z и говорят о спине, направленном “вверх” или “вниз”. Как и при описании проекции момента орбитального движения, это не более, чем общепринятая терминология – ось z ничем не выделена, и вместо нее можно выбрать любое другое направление – результаты вычисления наблюдаемых от такого выбора не зависят.

4.4 Заполнение электронных оболочек

Теперь мы готовы к тому, чтобы рассмотреть структуру электронных оболочек атомов. Было бы неправильно думать, что свойства электронов в многоэлектронных атомах описываются той же моделью, что и свойства электрона атома водорода. Дело в том, что электрон в таких атомах движется в эффективном потенциале, созданном не только ядром, но и другими электронами. Последние делокализованы в пространстве, так что потенциал, в котором находится электрон, не является кулоновским. К тому же (и это представляет наиболее серьезную проблему) движение электронов является *коррелированным*: поскольку остальные электроны тоже “чувствуют” присутствие данного, речь в действительности идет не о движении одиночного электрона в эффективном потенциале, а о *квантовой задаче многих тел*. Соответственно, при последовательном описании свойств многоэлектронных атомов следует говорить не о квантовых состояниях отдельных электронов, а о состояниях *электронной оболочки в целом*. Эти состояния принято называть *термами*.

Однако, для целей классификации результаты, полученные для атома водорода, в случае многоэлектронных атомов использовать все-таки можно. На этом языке речь идет о последовательном (с учетом принципа Паули) заполнении состояний с увеличением номера атома в таблице Менделеева. В случае атома водорода, энергия зависит только от главного квантового числа n ; при учете межэлектронного кулоновского взаимодействия, появляется также зависимость от l (мы проиллюстрируем это обстоятельство на примере валентных электронов щелочных металлов). Совокупность электронов с заданными n, l принято называть *электронной оболочкой*. Оболочку называют заполненной, если она содержит число электронов, максимально допустимое в соответствии с принципом Паули. Естественно ожидать, что при увеличении атомного номера оболочки заполняются последовательно.

Представление о последовательном заполнении оболочек лежит в основе понимания периодичности химических свойств элементов, обнаруженной Д.И. Менделеевым. Дело в том, что химические свойства атомов определяются, в первую очередь, электронами наружных (то есть, имеющих максимальное главное квантовое число среди содержащих электроны) оболочек. Электроны этих оболочек имеют наименьшую энергию связи с атомом; кроме того, их орбиты имеют наибольший размер. Оба этих обстоятельства означают, что электроны наружных оболочек принимают участие в химических процессах. Компактные же полностью заполненные внутренние оболочки химически инертны; относящиеся к ним электроны отделить от атома посредством химических реакций практически невозможно. Поэтому, с

точки зрения химических свойств, например, атом натрия, имеющий единственный электрон 3s-оболочки, и атом калия с 4s-электроном весьма схожи. Каждый период таблицы Менделеева заканчивается инертным газом, внешние оболочки которого полностью заполнены и который поэтому практически не вступает в химические реакции. Следующий период начинается щелочным металлом, внешняя оболочка которого содержит единственный электрон. Свойства элементов разных периодов, внешние оболочки которых содержат одинаковое количество электронов, схожи.

Сказанное в полной мере относится к первым строкам таблицы Менделеева, но нуждается в определенном уточнении применительно более тяжелым атомам. Перед тем, как это уточнение сделать, имеет смысл обсудить свойства спектров атомов щелочных металлов.

4.5 Спектры атомов щелочных металлов

Оптические спектры атомов первой группы таблицы Менделеева определяются переходами единственного электрона внешней оболочки (в соответствии со сказанным выше, энергия связи электронов полностью заполненных внутренних оболочек весьма высока, и соответствующие переходам этих электронов линии лежат далеко в ультрафиолете). При этом, поскольку радиус внешней оболочки заметно больше радиусов внутренних, можно считать, что электрон движется в потенциале, близком кулоновскому полю единичного заряда (заряд ядра минус модуль заряда остальных электронов). Уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции $R(r)$ такого электрона имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} R + \frac{l(l+1)}{r^2} R \right) + \frac{e^2}{r} R + V(r)R = ER. \quad (4.6)$$

Здесь $V(r)$ – поправки, определяющие отклонение потенциала от кулоновского и связанные с конечностью размера внутренних оболочек. Величина $V(r)$ при увеличении r должна убывать быстрее, чем $1/r$ – электрон, расположенный очень далеко от ядра, “не чувствует” конечности размера внутренних орбиталей и находится в чисто кулоновском поле. Естественно разложить $V(r)$ в ряд Лорана⁵ и ограничиться учетом первого члена этого ряда:

$$V(r) = \frac{v_2}{r^2}. \quad (4.7)$$

Подставляя это выражение в уравнение для радиальной части волновой функции

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} R + \frac{l(l+1)}{r^2} R \right) + \frac{e^2}{r} R + \frac{v_2}{r^2} R = ER, \quad (4.8)$$

убеждаемся, что роль поправки сводится к эффективному изменению величины орбитального момента:

$$l_{\text{eff}}(l_{\text{eff}} + 1) = l(l + 1) + \frac{2mv_2}{\hbar^2}. \quad (4.9)$$

⁵Напомним: имеется в виду разложение вблизи $r = \infty$; например: $1/(r+a)|_{r \rightarrow \infty} = 1/r - a/r^2 + a^2/r^3 - \dots$

Считая поправку малой, раскладываем левую часть в ряд по $l_{\text{eff}} - l$ и находим

$$l_{\text{eff}} = l + \frac{2mv_2}{(2l+1)\hbar^2}. \quad (4.10)$$

В соответствии с результатами, полученными для атома водорода, энергии уровней равны

$$E_{n_r, l} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(n_r + l_{\text{eff}} + 1)^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(n_r + l + 1 + \frac{2mv_2}{(2l+1)\hbar^2})^2}. \quad (4.11)$$

Видно принципиальное отличие полученной формулы от случая атома водорода – энергия зависит не только от главного квантового числа $n = n_r + l + 1$, но и (при заданном n) от орбитального квантового числа l . Мы говорили, что зависимость энергии только от главного квантового числа (случайное вырождение) является особенностью кулоновского потенциала. Как только мы ввели в рассмотрение отклонение потенциала от вида $1/r$, это вырождение оказалось снято (но уровни по-прежнему вырождены по величине проекции момента m , поскольку вращательная симметрия системы не нарушена!).

На практике, знак поправки таков, что уровни с большим значением момента оказываются расположенными выше по шкале энергий. Для примера, энергия связи состояния $2s$ примерно равна 5.4 eV , а $2p - 3.3 \text{ eV}$ (для “истинно” водородоподобной системы эти энергии были бы равны!). Переход между этими двумя состояниями, происходящий с испусканием фотона с длиной волны 670 nm , определяет характерный красный цвет паров лития. У натрия аналогичный переход соответствует длине волны 590 nm , поэтому его пары имеют желтый цвет.

4.6 Правило Маделунга. Атомы побочных групп

То обстоятельство, что энергии электронных состояний в многоэлектронном атоме растут с ростом орбитального квантового числа, влечет важные следствия для структуры периодической системы элементов. Зависимость $E(l)$ приводит к тому, что электрон с квантовыми числами n, l может иметь энергию, большую чем с квантовыми числами $n+1, l'$, если $l' < l$. В результате, при увеличении атомного номера, в некоторых случаях первыми заполняются оболочки, характеризующиеся большим значением главного квантового числа, но меньшим – орбитального. Как правило, применимо эмпирическое *правило Маделунга* (E. Madelung, 1936) (оно же – правило В.М. Клечковского, 1951): оболочки заполняются по мере роста суммы $n+l$, при равных значениях $n+l$ вначале заполняется оболочка с меньшим n .

Для ряда элементов, одновременно заполненными не полностью являются две оболочки: присутствуют s электроны внешней оболочки, и одновременно имеются свободные d или f орбитали с предшествующим главным квантовым числом. Химические свойства таких элементов определяются, в первую очередь⁶, электронной конфигурацией внешней оболочки. Эти элементы выпадают из простейшей схемы чередования химических свойств с ростом атомного номера, поэтому в таблице Менделеева их часто отмечают

⁶Но отнюдь не полностью!

как элементы *побочных групп*. Другое название этих элементов – *переходные металлы*. Например, первая из побочных групп включает Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni – эти элементы имеют электроны 4s оболочки и одновременно не полностью заполненную 3d оболочку⁷.

4.7 Рентгеновские термы

Под рентгеновскими термами понимают состояния многоэлектронного атома, возникающие при удалении из него одного из электронов внутренних оболочек. Энергии таких термов относительно основного состояния весьма высоки и соответствуют энергиям электромагнитных квантов рентгеновского диапазона. Получают рентгеновские термы, бомбардируя атом частицами (например, электронами), имеющими достаточно высокую энергию. Мы в нашем курсе уже сталкивались с рентгеновскими термами – при описании опытов Мозли. В этих опытах реализовывался один из возможных механизмов релаксации конфигурации рентгеновского терма к состоянию с меньшей энергией – внутренний переход одного из электронов атома с более высоколежащей оболочки на “свободную” орбиталь, сопровождающийся испусканием рентгеновского кванта. Энергия последнего равна разности энергий атома до и после электронного перехода.

Существует и другой механизм релаксации, при котором испускания электромагнитных волн не происходит, а энергия уносится электроном, покидающим атом. В этом случае, в процессе релаксации участвуют два электрона из оболочки атома – один переходит на нижележащую свободную орбиталь (то есть, его энергия уменьшается), а другой – уходит из атома, унося высвободившуюся энергию. Описанный процесс называют эффектом Оже (P. Auger).

4.8 Механизмы связи в молекулах

Поговорив о структуре электронных оболочек атомов, мы переходим к вопросу о свойствах молекул. В первую очередь, необходимо обсудить природу сил, объединяющих отдельные атомы в молекулы. Различают два вида химической связи – ковалентную и ионную⁸.

4.9 Природа ионной связи

Ионная связь возникает при объединении в молекулу атомов, относящихся к существенно разным группам таблицы Менделеева. Например, ионная связь существует между атомами элементов I и VII группы – скажем Na и Cl (разумеется, при нормальных условиях NaCl является кристаллом; молекулы NaCl существуют в парах этого соединения). При формировании

⁷За этими элементами в периодической системе следует медь, 3d оболочка нейтрального атома которой заполнена, но энергия связи 3d электронов меньше, чем 4s, так что положительные ионы Cu⁺ имеют не полностью заполненную 3d оболочку. По этой причине медь также относят к переходным металлам.

⁸Между атомами действуют также *Ван-дер-Ваальсовы силы* притяжения. Однако, они существенны, в первую очередь, не при формировании молекул, а при объединении молекул в более крупномасштабные структуры.

ионной связи один или несколько электронов одного из атомов переходят в состояние, локализованное вблизи другого (в нашем примере, 3s-электрон Na переходит в состояние, соответствующее 3d-орбитали Cl). Очевидно, при этом атомы оказываются разноименно заряженными, и между ними действует кулоновская сила притяжения. Атомы сближаются на расстояние, ограниченное размером их заполненных оболочек (в случае NaCl, второй оболочки Na и третьей оболочки Cl).

Естественно задаться вопросом – по какой причине электрону оказывается энергетически выгодно перейти на оболочку другого атома, вопреки кулоновским силам, казалось бы, стремящимся удерживать атомы в электрически нейтральном состоянии? Некоторое представление о природе этого процесса можно получить, рассмотрев взаимодействие электрона с находящимся на некотором расстоянии от него электронейтральным атомом. Как можно понять, между такими объектами возникает сила притяжения, вызванная *поляризацией* электронных оболочек атома. Кулоновское поле электрона приводит к деформации оболочек, так что в среднем электроны атома оказываются смещены относительно ядра в сторону, противоположную местоположению “внешнего” электрона. Очевидно, что в такой ситуации действующая на электрон сила притяжения к положительному ядру превалирует над силой отталкивания со стороны электронов атома, так что *электрон притягивается к электронейтральному атому*. Важно отметить, что рассмотренный эффект существенно связан с конечностью размеров атома и наличием у него внутренней структуры. Разумеется, величина поляризации зависит от структуры электронных оболочек атома – чем легче их деформировать, тем поляризация больше. Оказывается, что полностью заполненные оболочки поляризуются весьма слабо⁹. Таким образом, действующая на 3s-электрон натрия сила, связанная с поляризацией электронных оболочек хлора, значительно больше аналогичной силы, действующей со стороны атомного остова Na.

Изложенные выше аргументы должны быть рассмотрены как наводящие соображения, говорящие о возможности перехода электронов с одного атома на другой, связанного с эффектами перестройки электронных оболочек. В действительности, при формировании ионной связи расстояние между атомами оказывается слишком мало, а перестройка электронных орбиталей – слишком существенна, чтобы имело смысл непосредственно говорить об эффекте поляризации. Принято оперировать терминами *энергия ионизации* (энергия, необходимая для отрыва электрона от атомного остова) и *энергия сродства к электрону* (энергия связи электрона с нейтральным атомом). Образование ионной связи, очевидно, возможно, если энергия сродства к электрону одного из атомов больше энергии ионизации другого. Изложенные выше соображения объясняют происхождение части энергии сродства к электрону, связанной с их взаимодействием на достаточно далеких расстояниях, и помогают понять, почему энергия сродства к электрону различных атомов может сильно различаться по величине.

⁹Это связано, в частности, с большой величиной энергии, необходимой для перевода электронов этих оболочек в возбужденное состояние – как вы узнаете впоследствии, формула для величины поляризации содержит эту энергию в знаменателе. Кроме того, важно, что размер орбиталей внутренних оболочек существенно меньше размера внешних – как мы выяснили, возможность возникновения поляризации связана с конечностью размеров системы, так что чем оболочка компактнее, тем ее поляризация меньше.

4.10 Природа ковалентной связи

Ковалентная связь возникает при объединении в молекулы одинаковых или близких по химическим свойствам атомов. В качестве простейшего примера можно привести такие молекулы, как O_2 , N_2 , CO_2 . В этом случае, перенос заряда с атома на атом мал, либо отсутствует. Силы, удерживающие атомы молекуле, оказываются связаны с возникновением электронных состояний с *делокализованными* электронами, то есть состояний, в которых электрон не привязан к одному конкретному атому.

Природу этой связи можно понять, рассмотрев модельную задачу об одномерном движении частицы в потенциале двух δ -ям. Две ямы будут моделировать атомные остовы, а частица – электрон внешней оболочки, создающий ковалентную связь. Уравнение Шредингера для рассматриваемой модельной системы

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(x) - W\delta(x + l/2)\psi(x) - W\delta(x - l/2)\psi(x) = E\psi. \quad (4.12)$$

Здесь l – расстояние между ямами, W – величина δ -ям, которые мы для простоты считаем одинаковыми (напомним, для прямоугольного профиля потенциала W есть произведение глубины ямы на ее ширину). Нас будут интересовать свойства основного (имеющего наименьшую энергию) состояния системы.

Волновая функция состояния с энергией¹⁰ $E = -\frac{\kappa^2\hbar^2}{2m}$ имеет вид $a_1e^{\kappa x}$ в области $x < -l/2$, $b_1e^{\kappa x} + b_2e^{-\kappa x}$ в области $-l/2 < x < l/2$, и $a_2e^{-\kappa x}$ в области $x > l/2$. Как и для задачи с прямоугольной ямой, которую мы разбирали несколькими лекциями ранее, анализ можно существенно упростить, если учесть симметрию потенциала, в котором находится частица. Как мы выяснили при рассмотрении состояний дискретного спектра частицы в прямоугольном потенциале, волновые функции состояний дискретного спектра в четном потенциале являются или четными, или нечетными функциями координат. Интересующая нас функция основного состояния является четной¹¹. Четность волновой функции означает $a_1 = a_2, b_1 = b_2$ (далее индекс у коэффициентов a, b опустим). Условия сшивки волновой функции и ее производной для левой ямы¹² дают два уравнения

$$\begin{aligned} ae^{-\kappa l/2} &= b(e^{\kappa l/2} + e^{-\kappa l/2}); \\ a\kappa e^{-\kappa l/2} &= b\kappa(-e^{\kappa l/2} + e^{-\kappa l/2}) + ae^{-\kappa l/2} \frac{2m(Ud)}{\hbar^2}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Условие совместности этой линейной системы (требование обращения в нуль детерминанта) имеет вид:

$$\kappa = \frac{m(Ud)}{\hbar^2}(1 + e^{-\kappa l}). \quad (4.14)$$

Это уравнение, хотя и является трансцендентным, поддается несложному анализу. Если ямы находятся бесконечно далеко друг от друга, экспонента

¹⁰Напомним на всякий случай, что энергия состояний дискретного спектра в рассматриваемой системе отрицательна

¹¹Вы можете убедиться в этом непосредственно, рассмотрев энергию состояния с нечетной волновой функцией. Но, в действительности, такой необходимости нет – существует теорема, гласящая, что волновая функция основного состояния конечной системы имеет ту же симметрию, что и гамильтониан.

¹²Из условий для правой ямы получается ровно та же система.

обращается в нуль, и мы получаем $\kappa = \frac{m(Ud)}{\hbar^2}$, что дает $E(l \rightarrow +\infty) = -\frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m} = -\frac{(Ud)^2 m}{2\hbar^2}$, то есть энергию связи состояния в одиночной δ -яме. Учет конечной величины l приводит к увеличению этого значения по модулю; чем ямы ближе, тем энергия системы меньше. В пределе очень близких ям $l \rightarrow 0$ энергия связи увеличивается в четыре раза: $E(l \rightarrow 0) = -\frac{2(Ud)^2 m}{\hbar^2}$.

Полученный результат можно интерпретировать следующим образом. В системе с двумя эквивалентными минимумами потенциала (в частности, в потенциале двух атомных остовов) основное состояние соответствует равной вероятности обнаружить частицу вблизи каждого минимума (в нашем примере это вытекает из четности волновой функции). При этом, энергия основного состояния оказывается меньше, чем для системы с одиночными минимумами. Это и означает, что между атомами действуют силы притяжения, обусловленные “коллективизацией” электронов. Характерный радиус действия возникающих сил равен размеру орбитали; с увеличением расстояния между остовами эти силы уменьшаются экспоненциально.

Рассмотренный пример вновь надо рассматривать как предельно упрощенный. В образовании ковалентной связи в действительности участвует не один, а несколько электронов, которые сами взаимодействуют друг с другом кулоновскими силами. Потенциалы атомных остовов ни в коей мере нельзя описывать как δ -ямы. Тем не менее, сделанные нами качественные выводы остаются в силе.

4.11 Колебательные спектры молекул

Перейдем теперь к описанию оптических спектров молекул. Разумеется, эти спектры содержат линии, связанные с переходами между различными состояниями электронов. Природа этих переходов не слишком отличается от случая отдельных атомов. Основное отличие состоит в том, что присутствие в молекуле нескольких атомов понижает симметрию задачи, и классификация линий из-за этого оказывается более сложной. Мы, однако, не будем подробно останавливаться на этом вопросе, а рассмотрим свойства молекулярных спектров, связанные с *движением атомов*, образующих молекулу. В случае отдельных атомов равномерное и прямолинейное движение атома, очевидно, не приводит к появлению каких-либо дополнительных спектральных линий¹³. Для состоящей же из нескольких атомов молекулы, помимо поступательного движения, следует рассмотреть также вращение вокруг центра масс и колебательные движения.

Начнем с анализа колебательного движения, которое связано с изменением расстояния между атомами молекулы. Для простоты, рассмотрим молекулу, состоящую из двух одинаковых атомов (например, молекулу H_2 , O_2 или N_2). Энергия связи системы U зависит от расстояния между атомами R — она минимальна для некоторого межатомного расстояния и увеличивается при отклонении от такой конфигурации. Качественно, зависимость $U(R)$ имеет вид знакомого вам потенциала Леннарда-Джонса (J. E. Lennard-Jones, 1924). Конкретный вид зависимости $U(R)$ нас интересовать не будет; мы ограничимся анализом характерных масштабов задачи. Как мы говорили,

¹³Линии в лабораторной системе отсчета оказываются сдвинутыми из-за эффекта Доплера.

образование молекул связано с перестройкой их электронных орбиталей. Этот механизм не является релятивистским, поэтому постоянная тонкой структуры в характерных масштабах задачи не фигурирует. Кроме того, пока мы рассматриваем задачу о взаимодействии атомов *на фиксированном расстоянии*, в ответе не может появиться масса ядра – эта величина характеризует свойства *движения* ядер. Таким образом, простейшая оценка говорит, что характерная глубина и ширина кривой $U(R)$ определяется атомными масштабами. В действительности, эта оценка является весьма грубой – размеры атомов из середины таблицы Менделеева в несколько раз превышают радиус Бора, а характерные энергии существенно меньше ридберга. На практике, глубина ямы U_0 – энергия связи молекулы – имеет порядок десятых долей эВ. Тем не менее, нам важно запомнить, что зависимость $U(R)$ не содержит фундаментальных малых величин α и $\frac{m}{M}$.

Вблизи минимума зависимость $E(R)$ можно аппроксимировать параболой и описывать колебания молекулы с помощью модели гармонического осциллятора с жесткостью, равной второй производной потенциала в точке минимума (несколько позже мы вернемся к вопросу о правомерности такого описания):

$$\frac{\hat{p}^2}{2M^*}\psi(R) + \frac{U''|_{\min}R^2}{2}\psi(R) = E\psi(R). \quad (4.15)$$

Здесь M^* – приведенная масса осциллятора, для двухатомной молекулы равная половине массы атома; энергия E отсчитывается от минимума потенциала U_{\min} . В соответствии со сказанным выше, вторая производная потенциала в точке минимума в атомных единицах малостей не содержит. Поэтому частота колебаний $\omega = \sqrt{\frac{U''|_{\min}}{M^*}}$ на атомной шкале оказывается малой – эта величина содержит \sqrt{M} в знаменателе, так что

$$\omega \sim \sqrt{\frac{m}{M}}\omega_{\text{at}}. \quad (4.16)$$

В соответствии с этой оценкой, колебательные частоты лежат в инфракрасном диапазоне спектра.

Энергии близких к основному колебательных уровней молекулы определяются формулой $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ (n называют *колебательным квантовым числом*). Разумеется, при повышении номера уровня E_n его энергия растет, так что для достаточно высоких уровней модель гармонического осциллятора уже не годится. Применимость модели гармонического осциллятора определяется условием $E_n \ll U_{\min}$. Поскольку величина U_{\min} малостей не содержит, получаем оценку $n \ll \sqrt{\frac{M}{m}}$, то есть модель гармонического осциллятора применима для достаточно большого числа уровней. Общее количество уровней колебательного спектра $n_{\max} \sim \sqrt{\frac{M}{m}}$; на практике колебательные спектры включают десятки уровней.

Многоатомные молекулы характеризуются более сложными колебательными спектрами, соответствующими различным собственным колебаниям системы. Число этих собственных колебаний есть полное число степеней свободы системы за вычетом поступательных и вращательных, то есть молекула из N атомов в общем случае имеет $3N - 6$ колебательных мод. Для *линейных* молекул, атомы которых расположены вдоль одной прямой, число возможных вращений на единицу меньше, так что такие молекулы имеют

$3N - 5$ колебательных степеней свободы. Важно отметить, что колебательные моды сложных молекул нередко связаны с движением не всей молекулы в целом, а каких-либо небольших ее частей – отдельных атомных групп. Соответственно, частоты таких колебаний определяются свойствами указанных групп.

Имеются подробные таблицы значений колебательных частот различных соединений. Это дает возможность определять присутствие тех или иных соединений в исследуемых средах. Такое исследование, составляющее предмет *колебательной спектроскопии*, обладает рядом преимуществ перед химическим анализом – оно может проводиться дистанционно, требует малых временных затрат и не приводит к разрушению исследуемого образца.

Колебательные спектры можно как непосредственно исследовать в инфракрасном диапазоне, так и “переносить” их в оптический диапазон, используя эффект комбинационного рассеяния¹⁴. В процессе комбинационного рассеяния, фотон оптического диапазона рассеивается на молекуле, передавая молекуле часть своей энергии, равную энергии кванта колебаний молекулы. При рассеянии на возбужденной (колеблющейся) молекуле возможен обратный процесс передачи энергии кванта колебаний рассеянному фотону. Говорят, соответственно, про *стоксову* (имеющую частоту $\omega - \Omega$) и *антистоксову* (имеющую частоту $\omega + \Omega$) компоненты спектра (здесь ω – исходная частота фотона, Ω – частота колебаний молекулы).

4.12 Вращательные спектры молекул

Колебательные спектры имеют вид четко выраженных спектральных линий, только если исследуемые молекулы помещены в жидкость. Если же речь идет о спектре газа, колебательный спектр существенно модифицируется из-за возможности вращения молекул (в жидкости вращение практически невозможно из-за взаимодействия молекулы с соседями).

Рассмотрим структуру вращательных спектров. Отвлекаясь от пространственной анизотропии молекул (которая, если не брать в расчет случай упомянутых выше линейных молекул, не меняет задачу принципиально), мы получаем задачу на собственные значения оператора вращательного момента, уже рассмотренную нами ранее. Величина квадрата момента импульса равна $\hbar^2 l(l + 1)$, где l – орбитальное квантовое число (напомним, каждому значению l соответствует $2l + 1$ возможных значений проекции момента импульса). Вращательная энергия, таким образом, составляет

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l + 1)}{2J}, \quad (4.17)$$

где момент инерции молекулы J по порядку величины равен произведению квадрата размера молекулы на ее массу. Отсюда сразу видно, что в атомных единицах $J \sim M$, то есть

$$E_l \sim \frac{m}{M} \hbar \omega_{\text{at}}. \quad (4.18)$$

¹⁴Этот эффект был практически одновременно и независимо обнаружен Л.И.Мандельштамом и Г.С.Ландсбергом в МГУ, и Ч.В.Раманом в Калькутте. В иностранной научной литературе принят термин “рамановское рассеяние”.

Уровни энергии вращательного спектра оказываются расположенными еще чаще, чем колебательные уровни (расстояние между уровнями с небольшими l отличается от расстояния между колебательными уровнями множителем $\sim \sqrt{\frac{m}{M}}$). На практике, столь малое межуровневое расстояние приводит к тому, что линии, соответствующие переходам во вращательном спектре, размываются в единую полосу. В спектрах газов такие полосы возникают на месте линий, соответствующих колебательным переходам.

4.13 Фононы. Закон дисперсии в одномерной цепочке

Перейдем теперь к рассмотрению свойств кристаллов. Важнейшей их особенностью является их *периодичность*: кристаллическая решетка переходит сама в себя при сдвиге на один или несколько периодов решетки¹⁵. Принято говорить о том, что кристаллы имеют *трансляционную симметрию*.

Одномерная периодическая структура переходит сама в себя при трансляции на nl , где l – период структуры, n – произвольное целое число (не обязательно положительное). Трехмерные кристаллы остаются неизменными при трансляциях вида $n_1\mathbf{l}_1 + n_2\mathbf{l}_2 + n_3\mathbf{l}_3$, где $\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2, \mathbf{l}_3$ – базовые векторы решетки кристалла. Минимальная по объему область кристалла, трансляциями которой можно получить всю решетку, называется *элементарной ячейкой*. Например, элементарная ячейка кристалла NaCl содержит один атом натрия и один – хлора.

То обстоятельство, что структура кристаллов периодична в пространстве, оказывается исключительно важным для определения их свойств. Мы рассмотрим две темы, для анализа которых трансляционная симметрия существенна: состояния электронов в кристаллах и колебания кристаллической решетки.

Вначале обсудим степени свободы кристаллов, связанные с колебаниями кристаллической решетки. Поскольку колебания кристаллической решетки — это, фактически, звуковые волны, соответствующие им в квантовой физике частицы принято называть *фононами*.

Запишем уравнения движения атомов решетки. Ситуация вполне аналогична случаю молекул — рассматривая движение атомов, можно ввести эффективную потенциальную энергию, зависящую от расстояния между ними, происхождение которой связано с перестройкой электронных орбиталей находящихся вблизи друг друга атомов. Существует конфигурация атомов, доставляющая минимум их потенциальной энергии (в случае кристаллов это — строго периодическая структура), и в случае малых отклонений от этой конфигурации можно ограничиться младшим — квадратичным — приближением для зависимости энергии от величины отклонения атомов от равновесной конфигурации. Напомним (мы говорили об этом применительно к молекулам), что фактически возможность использовать такое приближение связана с малостью отношения масс электрона и ядра.

¹⁵О том, что кристаллы представляют собой периодические в пространстве объекты, люди догадывались с XVIII века, основываясь на геометрии огранки природных кристаллов. Прямой проверкой послужили опыты Лауэ по дифракции рентгеновских лучей, о которых говорилось в начале курса.

Раз энергия квадратична по отклонениям атомов от положения равновесия, действующая на атомы сила (градиент энергии) *линейна* по их отклонению.

Запишем, для примера, классическое уравнение движения атомов одномерной цепочки со взаимодействием только между ближайшими соседями:

$$M\ddot{x}_j + K(2x_j - x_{j+1} - x_{j-1}) = 0 \quad (4.19)$$

Здесь M – масса атома, K – модуль жесткости. Мы учли, что взаимодействие определяется расстоянием между атомами и, поэтому, в формулах появляется разность их координат.

Решение уравнений движения следует искать в виде плоской волны $x_j = e^{i(kr_j - \omega t)}$, где $r_j = lj$ – равновесная координата атома (как обычно, подразумевается, что для фактического определения отклонений атомов следует взять действительную часть x_j). Прямая подстановка приводит к формуле для закона дисперсии

$$\omega = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \sin \frac{kl}{2}. \quad (4.20)$$

Отметим несколько особенностей этого результата. Во-первых, как легко проверить разложением синуса в ряд Тейлора, зависимость $\omega(k)$ при малых k *линейна*. Коэффициент пропорциональности в этой линейной зависимости $\omega(k \rightarrow 0) = Vk$, имеющий размерность скорости, есть *скорость звука в кристалле*. Далее, характерный масштаб частот звуковых колебаний, как и в случае молекул, фактически определяется параметром $\sqrt{\frac{m}{M}}$, так что акустические частоты оказываются малы по сравнению с атомным масштабом частоты (практически, верхняя граница фононного спектра соответствует ИК-области спектра).

В реальных кристаллах атомы движутся в трехмерном пространстве, так что вместо уравнения (4.19) возникает система из трех линейных уравнений. Соответственно, возникает три *ветви* закона дисперсии фононов $\omega_1(k), \omega_2(k), \omega_3(k)$. В области малых k каждая из них показывает линейное поведение.

Процедура квантования фононных степеней свободы, в принципе, ничем не отличается от знакомой нам процедуры для фотонов. Рассматриваемая система фактически представляет собой набор гармонических осцилляторов – каждому волновому числу k соответствует осциллятор с собственной частотой ω . В квантовом случае, спектр такого осциллятора определяется формулой $\hbar\omega(k)(n + \frac{1}{2})$. Отличие энергии основного состояния от нуля отражает присутствие *нулевых колебаний* – в силу принципа неопределенности атомы решетки не находятся точно в положениях, отвечающих минимуму энергии системы, а слегка “размазаны” вблизи этих точек. Напомним, что при конечной температуре средняя тепловая энергия (разница между средней энергией при заданной температуре и энергией основного состояния), запасенная в одной колебательной моде, равна

$$\Delta \bar{E} = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}. \quad (4.21)$$

При малых по сравнению с $\hbar\omega$ температурах осциллятор с экспоненциально близкой к единице вероятностью находится в основном состоянии (степень свободы выморожена, то есть практически не дает вклада в термодинамику

системы). В противоположном пределе $kT \gg \hbar\omega$ средняя энергия примерно равна kT – воспроизводится классический результат.

Наконец, важно обсудить вопрос о *полном количестве* фотонных мод. Во-первых, из формулы $x_j = e^{i(kr_j - \omega t)}$ видно, что величина k определена с точностью до слагаемого, кратного $2\pi/l$ ¹⁶. Для определения количества фотонных мод вновь рассмотрим для простоты одномерную цепочку и поступим аналогично тому, как мы делали в случае фотонов – рассмотрим систему большой, но конечной длины L и потребуем выполнения периодических граничных условий. Тогда, возможные значения k равны $k_n = 2\pi n/L$. Поскольку k фактически определена на отрезке $(-\pi/l, \pi/l]$ длиной $2\pi/l$, общее количество возможных значений k_n оказывается равно L/l , то есть числу атомов в цепочке. Это логично – перейдя на язык фононов, мы фактически сделали замену переменных, но общее число степеней свободы (равное для нашей одномерной модели числу атомов) при этом поменяться не могло. Для реальных кристаллов в трехмерном пространстве число степеней свободы и, соответственно, число фотонных мод, равно $3N$.

4.14 Теплоемкость фононного газа. Понятие о теории Дебая

Как и в случае фотонов, квантовые эффекты существенно влияют на термодинамику фононного газа. Только, если для света экспериментатором удобно измерять интенсивность, в случае кристаллической решетки проще всего оказалось исследовать теплоемкость системы. В случае ионных кристаллов, теплоемкость практически полностью определяется теплоемкостью решеточных степеней свободы, то есть – теплоемкостью фононов (в теплоемкость металлов при низких температурах заметный вклад вносят также электроны проводимости).

Сходство с фотонами усиливает тот факт, что закон дисперсии фононов (по крайней мере, в области малых k) также является линейным. Имеется однако, и важное отличие – если фотонные моды существуют при сколь угодно высоких частотах, фононный спектр ограничен сверху – ведь общее число фононных мод равно числу степеней свободы атомов кристалла.

Двух отмеченных обстоятельств – линейность закона дисперсии и известное совокупное число фононных мод – оказывается достаточно, чтобы построить теорию теплоемкости кристаллов, показывающую очень хорошее согласие с экспериментом. Это было сделано Дебаем (P.Debye) в 1912 году¹⁷.

Дебай для простоты предположил, что закон дисперсии фононов является линейным *всюду*, а не только для области малых k . Далее, чтобы получить необходимое число мод, он оборвал закон дисперсии некоторым

¹⁶Величина k называется *квазиволновым числом*, а $\hbar k$ – *квазиимпульсом* фонона. Диапазон физически различных значений квазиимпульса $(-\pi\hbar/l, \pi\hbar/l]$ называют зоной Бриллюэна. В трехмерном случае зона Бриллюэна представляет собой некий многогранник. Подробнее о понятии квазиимпульса мы поговорим применительно к состояниям электронов в кристалле

¹⁷До Дебая теорию теплоемкости кристаллов предложил Эйнштейн, но из-за неверного описания им фононного закона дисперсии теория Эйнштейна имеет только историческое значение.

значением модуля волнового числа $k = k_D$, фактически заменив, таким образом, зону Бриллюэна сферой. Для рассмотренной нами выше одномерной цепочки $k_D = \pi/l$; ответ для трехмерной системы отличается только коэффициентом – качественно, k_D просто есть величина, обратная постоянной решетки. Нельзя не отметить крайнюю простоту сделанных предположений.

Мы не будем выписывать формулы, а ограничимся качественным анализом поведения модели Дебая для температур, высоких или низких по сравнению *температурой Дебая*, определенной согласно формуле $kT_D = V\hbar k_D$.

Проще всего рассмотреть $T \gg T_D$. В этом случае, величина kT много больше расстояния между уровнями *любой* из имеющихся в системе фоновых мод. Поэтому для каждой из них применим классический результат $\Delta E = kT$, полная энергия системы равна NkT , то есть теплоемкость кристалла от температуры не зависит

$$C(T \gg T_D) = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \text{const.} \quad (4.22)$$

Рассмотрим теперь противоположный предел малых температур, $T \ll T_D$. Качественно, фоновые моды можно разделить на две группы. Те моды, частота которых много больше kT_D/\hbar , оказываются выморожены. Те же, частота которых много меньше указанной величины, по-прежнему могут быть описаны классической формулой $\Delta E = kT$. Разумеется, существует промежуточная область мод с $\hbar\omega \approx kT$, которые и не выморожены, и не ведут себя классическим образом, но для оценки про их существование можно забыть. Определим количество мод с “классической” термодинамикой. Оно определяется объемом сферы радиуса kT/V , то есть пропорционально $(kT)^3$. Поскольку энергия каждой из этих мод равна kT , полная энергия системы (отсчитанная от основного состояния) пропорциональна T^4 , то есть

$$C(T \ll T_D) = \frac{\partial \Delta \bar{E}}{\partial T} \propto T^3. \quad (4.23)$$

Дебай, разумеется, не ограничился качественным рассмотрением предельных случаев, а установил формулу, описывающую поведение теплоемкости в зависимости от температуры.

Как уже говорилось, эта формула неплохо описывает реальные экспериментальные данные. Это обстоятельство может вызвать удивление – в действительности, конечно, обе посылки теории Дебая далеки от истины. Закон дисперсии фононов, за исключением начального участка, не является линейным, и зона Бриллюэна представляет собой многогранник, а не сферу. Однако, как можно убедиться, в обоих рассмотренных пределах сделанные Дебаем предположения фактически не используются. Результат в пределе высоких температур опирается только на общее количество степеней свободы системы. В случае же низких температур, вклад в результат дает только начальный (линейный) участок зависимости $\omega(k)$ – остальные степени свободы выморожены, и ни характер зависимости $\omega(k)$ при $\hbar\omega \gg kT$, ни форма зоны Бриллюэна на термодинамику системы не влияют. Таким образом, Дебай построил *интерполяционную* формулу, имеющую две заведомо правильные асимптотики и “разумно” устроенную в промежуточной области.

4.15 Электрон в периодическом потенциале. Теорема Блоха. Основы зонной теории

Перейдем к рассмотрению поведения электронов в кристалле и определим, как выглядят их стационарные волновые функции. Используем уже встречавшееся нам рассуждение: если физические свойства кристалла при его сдвиге остаются неизменными, это означает, что волновая функция электрона при таком преобразовании может только менять фазу (от которой наблюдаемые не зависят):

$$\psi(x+l) = e^{i\phi}\psi(x). \quad (4.24)$$

Как обычно, мы для простоты пишем формулы для одномерного случая.

Самый простой пример системы, остающейся неизменной при сдвиге – свободное пространство. В этом случае, как мы знаем, волновые функции электронов имеют вид $e^{ipx/\hbar}$, и, соответственно, $\phi = pl/\hbar$. В случае движения электрона в периодическом потенциале, логично ввести имеющую размерность импульса величину $q = \hbar\phi/l$, так чтобы предыдущее уравнение приняло вид

$$\psi(x+l) = e^{iqx/\hbar}\psi(x). \quad (4.25)$$

Величину q надывают *квазиимпульсом*.

Видно, что в рассматриваемой одномерной системе квазиимпульс определен с точностью до слагаемого, кратного $2\pi\hbar/l$: добавление или вычитание этой величины приводит к изменению показателя экспоненты на $2\pi i$. Для однозначности принято считать, что значения квазиимпульса всегда лежат на отрезке $(-\pi\hbar/l, \pi\hbar/l]$. В случае трехмерных решеток, квазиимпульс представляет собой вектор, лежащий в пределах некоторого многогранника, называемого *зоной Бриллюэна*. Форма зоны Бриллюэна определяется конкретной структурой решетки, но ее объем во всех случаях равен $(2\pi\hbar)^3/V_0$, где V_0 – объем элементарной ячейки.

Вернемся к формуле (4.25) и обсудим вопрос, какие функции $\psi(x)$ могут обладать таким свойством. Нетрудно понять, что подходит $\psi(x)$ вида

$$\psi(x) = \phi(x)e^{iqx/\hbar}, \quad (4.26)$$

где $\phi(x)$ – некоторая функция, периодичная с периодом решетки l . В действительности, можно доказать, что *все собственные функции уравнения Шредингера с периодическим потенциалом* имеют вид (4.26). Это утверждение составляет содержание *теоремы Блоха* (F. Bloch).

4.16 Закон дисперсии. Разрешенные и запрещенные зоны

Дальнейший анализ свойств электронных состояний в периодическом потенциале проведем с использованием простой одномерной модели периодически расположенных δ -барьеров. Потенциальная энергия рассматриваемой модели равна

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} W\delta(x-jl). \quad (4.27)$$

В каждом из промежутков между δ -барьерами волновая функция представляет собой суперпозицию двух бегущих в противоположные стороны плоских волн, фазы которых нам будет удобно задать на левом краю промежутка¹⁸:

$$\psi(jl < x < (j+1)l) = a_j e^{ip(x-jl)/\hbar} + b_j e^{-ip(x-jl)/\hbar}. \quad (4.28)$$

Поскольку при переходе к следующему промежутку волновая функция может только менять фазу (условие (4.25)),

$$a_{j-1} = a_j e^{-iq/\hbar}, \quad b_{j-1} = b_j e^{-iq/\hbar} \quad (4.29)$$

На каждом из δ -барьеров должны выполняться условия сшивки – непрерывность волновой функции и скачок ее производной на величину $2mW\psi/\hbar^2$. С учетом уравнения (4.29), условия сшивки принимают вид

$$\begin{aligned} a_j e^{i(p-q)l/\hbar} + b_j e^{-i(q+p)l/\hbar} &= a_j + b_j \\ a_j e^{i(p-q)l/\hbar} - b_j e^{-i(q+p)l/\hbar} &= a_j - b_j + \frac{2Wm}{i\hbar p} (a_j + b_j). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Условие совместности этой линейной однородной системы – равенство нулю ее детерминанта. Приравняв детерминант нулю, после некоторых преобразований получаем условие

$$\cos \frac{pl}{\hbar} - \frac{Wm}{p\hbar} \sin \frac{pl}{\hbar} = \cos \frac{ql}{\hbar}. \quad (4.31)$$

Важно сразу отметить следующее обстоятельство: некоторые значения p недостижимы ни при каком q – стоящая в левой части функция может принимать значения, по модулю большие единицы. Поскольку закон дисперсии определяется формулой $E = \frac{p^2}{2m}$, это означает возникновение *запрещенных зон* – отрезков на оси энергий, на которых состояния непрерывного спектра отсутствуют. Участки же спектра, в которых такие состояния есть, называются *разрешенными зонами* (или, для упрощения языка, просто зонами). В рассматриваемой задаче запрещенные зоны существуют при любом ненулевом W ; они “рождаются” вблизи значений p , соответствующих обращению $\cos \frac{ql}{\hbar}$ по модулю в единицу, то есть при

$$q = \pm (\pi + n\pi) \frac{\hbar}{l}. \quad (4.32)$$

(пожалуйста, посмотрите еще раз на выписанные формулы, перечитайте последний абзац и убедитесь в сказанном сами!).

Если решить выписанное уравнение и построить график энергии $E(p) = \frac{p^2}{2m}$, как функции q , получится график, имеющий вид параболы $E = \frac{p^2}{2m}$, которая искажена и терпит разрыв вблизи границ зоны Бриллюэна, положение которых как раз определяется формулой (4.32).

Физические причины возникновения запрещенных зон связаны с выполнением так называемого условия Брэгговского отражения – при движении электрона в кристалле, он отражается от каждого из барьеров, но

¹⁸Разумеется, можно, например поместить в показатель x вместо $x-jl$, то есть отсчитывать фазы от начала координат. Это приведет только к изменению фазовых множителей a_j, b_j и не повлияет на физически значимые результаты.

при условии (4.32) отраженные волны складываются конструктивно, так что отражение от решетки в целом оказывается весьма эффективным. В результате, распространение оказывается невозможным, поскольку волна де-Бройля полностью отражается от решетки, и возникает запрещенная зона.

Конечно, поскольку квазиимпульс q определен с точностью до $2\pi/l$, кривую закона дисперсии параллельными переносами можно поместить в пределы области $(-\pi/l, \pi/l]$ (в трехмерном случае, в пределы зоны Бриллюэна). График закона дисперсии в этом случае представляет собой набор непересекающихся отрезков кривых, каждый из которых лежит в пределах $(-\pi/l, \pi/l]$.

Понятие о существовании запрещенных зон лежит в основе зонной теории твердых тел. Вернемся к рассмотренной одномерной модели и выясним, чему равно количество различных электронных состояний, энергия которых лежит ниже первой запрещенной зоны.

Как мы уже знаем, для подсчета числа состояний надо ввести размер квантования L и рассмотреть систему с периодическими граничными условиями. Рассуждения напоминают рассмотренный выше случай фононов, за исключением важной поправки: в одном состоянии могут существовать *два электрона с противоположными проекциями спина*. Отсюда можно заключить, что все состояния до первой запрещенной зоны заполнены, если на атом приходится 2 электрона. Аналогично, 4 электрона на атом означают заполнение всех состояний вплоть до второй запрещенной зоны¹⁹. Для нечетного же числа электронов на атом, одна из зон оказывается *полузаполненной*.

Для трехмерных кристаллов картина, разумеется, несколько усложняется, но качественный вывод сохраняется — в зависимости от числа электронов в атоме, существуют кристаллы с полузаполненными зонами и кристаллы, в которых имеются только целиком заполненные и пустые (вышележащие) зоны.

Существование полузаполненных зон принципиальным образом сказыв-

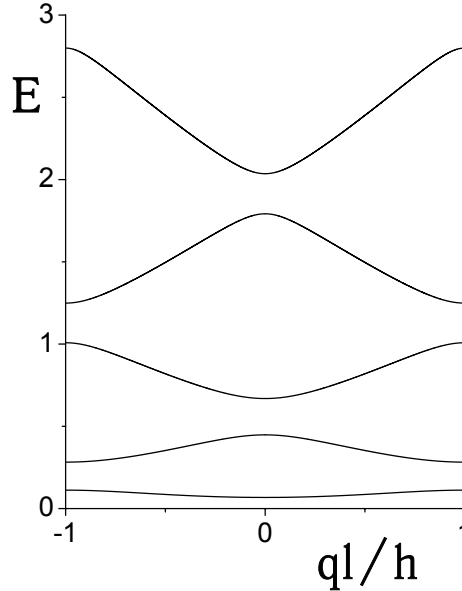


Рис. 4.1: Закон дисперсии (зависимость энергии от квазиимпульса), соответствующий периодическому набору δ -барьеров.

¹⁹Напомним, что для фононов из-за ограниченности числа степеней свободы, в нашем рассмотрении получилась всего одна зона. Несколько зон для фононов появляется, если рассмотреть кристалл с несколькими атомами в элементарной ячейке. Для электронов же, во всяком случае на уровне рассматриваемой нами модели, число зон бесконечно.

вается на электронных свойствах веществ. Именно такие кристаллы являются металлами – под воздействием приложенного поля электроны могут “перетекать” между состояниями полузаполненной зоны, создавая электрический ток. В отсутствие же полузаполненных зон тока не возникает.

4.17 Электроны и дырки в полупроводниках. Эффективная масса

Таким образом, в соответствии с принципом Паули, электроны в кристаллах заполняют состояния в разрешенных зонах вплоть до некоторой “граничной” энергии (называемой энергией Ферми). Если при этом заполненным оказывается целое число зон, вещество представляет собой диэлектрик или полупроводник, если же имеются зоны, заполненные частично, перед нами металл.

Полупроводники отличаются от диэлектриков меньшей шириной запрещенной зоны, разделяющей заполненные и незаполненные состояния (условно считают, что запрещенная зона в полупроводниках не превышает 3-4 eV) и возможностью наличия в них *носителей заряда*, то есть электронов в нижней по энергии незаполненной зоне (ее называют валентной зоной) или вакансий (*дырок*) в верхней заполненной зоне (зоне проводимости). Появление свободных зарядов может быть связано как с нагревом (в соответствии со статистикой Ферми-Дирака), так и с *допированием* – добавлением примесей, электроны которых могут покидать примесные атомы, уходя в состояния непрерывного спектра зоны проводимости (в этом случае говорят о допировании электронами), либо, наоборот, способных “захватывать” электроны валентной зоны (допирование дырками). Наличие свободных носителей заряда означает возможность протекания электрического тока²⁰.

Концентрация носителей заряда в полупроводниках, в зависимости от допирования и температуры, может колебаться в весьма широких пределах – от менее чем 10^{10} до более чем 10^{18} см⁻³. Однако, во всех случаях эта величина мала по сравнению с концентрацией электронов в металле. Поэтому при анализе свойств полупроводников часто можно считать, что электроны зоны проводимости находятся в окрестности минимума (*дна*) зоны проводимости, а дырки – вблизи максимума (*потолка*) валентной зоны. Исключение составляют задачи о неравновесной динамике носителей, когда, например, под воздействием оптического излучения, электроны или дырки могут оказаться в любой точке зоны. В окрестности минимума зависимость энергии от квазиимпульса можно аппроксимировать квадратичной формулой $\epsilon = \frac{(q-q_0)^2}{2m^*}$, где q_0 определяет положение минимума, а величину m^* , имеющую размерность массы, принято называть *эффективной массой* носителей. *Таким образом, во многих случаях носители в полупроводниках ведут себя так же, как свободные частицы; различие связано только с величиной массы.* Разумеется, величины эффективной массы носителей в разных полупроводниках различаются; более того, для каждого полупроводника различны также значения эффективной массы электронов и эф-

²⁰ Диэлектрики, в принципе, тоже можно допировать, но к существенному увеличению проводимости это не приводит, поскольку заряды в них характеризуются малой *подвижностью* и склонны к *автолокализации*.

фективной массы дырок. Типично, эффективная масса носителей составляет $0.1 \div 1$ массы свободного электрона.

4.18 Движение волнового пакета в среде с произвольным законом дисперсии. Фазовая и групповая скорость

Для задач неравновесной динамики носителей в полупроводниках, а также для электронов в металлах описание в терминах эффективной массы неприменимо. Необходимо рассмотреть свойства частицы, характеризуемой законом дисперсии $\epsilon(q)$ произвольного вида.

Рассмотрим, прежде всего, классический предел: определим, с какой скоростью движется волновой пакет, то есть воспроизведем вывод из первой главы, но для случая закона дисперсии общего вида. Как обычно, для простоты ограничимся одномерным случаем. Волновой пакет, “собранный” из блоховских волн, в начальный момент времени имеет вид

$$\psi(x) = \int \phi_q(r) e^{iqx/\hbar} e^{-(q-q_0)^2/2\Delta q^2} dq. \quad (4.33)$$

Здесь первый сомножитель под знаком интеграла – периодическая блоховская “набивка”. Эволюция каждой из плоских волн определяется энергией соответствующего состояния, так что движение волнового пакета описывается формулой

$$\psi(x, t) = \int \phi_q(r) e^{i(qx - \epsilon(q)t)/\hbar} e^{-(q-q_0)^2/2\Delta q^2} dq. \quad (4.34)$$

Поскольку нас интересует классический предел, необходимо рассмотреть волновой пакет с малой неопределенностью квазиимпульса Δq . В этом случае, закон дисперсии можно разложить в ряд вблизи q_0 : $\epsilon(q) \approx \epsilon(q_0) + \left. \frac{\partial \epsilon}{\partial q} \right|_{q_0} (q - q_0)$. Получаем

$$\psi(x, t) = e^{-i(\epsilon(q_0) - \left. \frac{\partial \epsilon}{\partial q} \right|_{q_0} q_0)t/\hbar} \int \phi_q(r) e^{iq(x - \left. \frac{\partial \epsilon}{\partial q} \right|_{q_0} t)/\hbar} e^{-(q-q_0)^2/2\Delta q^2} dq. \quad (4.35)$$

Предынтегральный множитель влияет только на изменение фазы волновой функции с течением времени; на величины наблюдаемых эта величина влияния не оказывает. В подынтегральном же выражении координата и время входят только в комбинации $x - \left. \frac{\partial \epsilon}{\partial q} \right|_{q_0} t$, то есть, с точностью до фазы, в рассматриваемом приближении волновой пакет остается неизменным в системе координат, движущейся со скоростью $\left. \frac{\partial \epsilon}{\partial q} \right|_{q_0}$. Иными словами, в неподвижной системе координат *скорость движения частицы равна $\left. \frac{\partial \epsilon}{\partial q} \right|_{q_0}$* .

Скорость $\left. \frac{\partial \epsilon}{\partial q} \right|_{q_0}$ называют *групповой*. Следует подчеркнуть, что групповая скорость является характеристикой движения именно волнового пакета, составленного из множества плоских волн. Задача об одиночной плоской волне $\psi(x, t) = \phi_q(x) e^{i(qx - \epsilon(q)t)/\hbar}$ величины групповой скорости не содержит; рассматривая эту задачу, можно получить только *фазовую* скорость

$\epsilon(q)/q$, в общем случае, очевидно, отличающуюся от групповой. Эта величина определяет скорость движения “горбов” синуса в действительной и мнимой частях волновой функции; однако, с этой скоростью не распространяется что-либо материальное (масса либо энергия).

Последнее утверждение оказывается особенно существенным, если обратиться к вопросу о распространении *фотонов* в средах с зависящим от частоты показателем преломления $n(\omega)$. Задача вполне аналогична рассмотренной выше: фазовая скорость (скорость движения “гребней” синуса в монохроматической волне) равна $c/n(\omega)$, а групповая скорость (скорость распространения волнового пакета), соответственно, $\frac{\partial}{\partial \omega} \frac{\omega c}{n(\omega)} = \frac{c}{n(\omega)} - \frac{c}{n^2(\omega)} \frac{\partial n}{\partial \omega}$. В некоторых средах, например, в плазме, в определенном частотном диапазоне $n(\omega) < 1$, то есть фазовая скорость оптической волны на этих частотах превышает скорость света. Это находится в кажущемся противоречии с выводами специальной теории относительности. Однако, разумеется, на самом деле никакого противоречия нет. Теория относительности запрещает передачу *информации* со скоростью, превышающей световую (в этом случае, нашлась бы система отсчета, в которой следствие происходит раньше причины). Но бегущая монохроматическая волна никакой информации не передает: для передачи информации необходим импульс (волновой пакет)²¹. Групповая же скорость, определяющая скорость распространения волновых пакетов, во всех случаях оказывается меньше световой.

4.19 Размерное квантование. Понятие о наноструктурах

Рассмотренное выше описание электронов как волновых пакетов является *полуклассическим*: квантовая природа электрона фактически проявляется только в форме закона дисперсии, в остальном же волновой пакет ведет себя как классическая частица. Интерес представляют системы, в которых электроны проводимости проявляют квантовые свойства существенным образом.

Ярким примером таких систем являются *наноструктуры* – твердотельные системы с характерными размерами порядка нанометров. Известно большое количество типов наноструктур. Наночастицы, в соответствии с названием, представляют собой изолированные частицы нанометрового размера. *Квантовыми точками* называют “островки”, состоящие из материала с меньшей величиной запрещенной зоны, в материале с большей запрещенной зоной (системы с обратным соотношением запрещенных зон называют квантовыми антиточками). Аналогичные системы, размеры которых в одном направлении значительно больше, чем в двух других, называют *квантовыми проволоками*. В этом случае порядка нанометра должна быть “толщина” проволоки. Слой нанометровой толщины с запрещенной зоной, более узкой, чем в окружающем веществе, называют *квантовой ямой*, а систему чередующихся слоев – *сверхрешеткой*.

Наноструктуры получают при помощи различных технологий, включая химический синтез и даже биологические методы. Отдельного упомина-

²¹ Либо переменная во времени модуляция световой волны, которая также распространяется с групповой, а не фазовой скоростью.

ния заслуживает технология выращивания *эпитаксиальных* полупроводниковых наноструктур. Такие структуры изготавливают из двух или более полупроводников, имеющих близкие периоды решетки (например, GaAs и AlAs). Термин “эпитаксиальные” означает, что при переходе от одного вещества к другому кристаллическая решетка не нарушается. То есть, с точки зрения задачи о движении электрона в периодическом потенциале в разных частях такой структуры различается только величина периодического потенциала, при этом на границе между различными частями отсутствуют дефекты, всякого рода скачки потенциала и т.п.

Наноструктуры позволяют реализовать экспериментально модели, включающие движение в прямоугольном потенциале. При этом, возникает иерархия масштабов: изменение потенциала в пределах периода решетки ответственно за формирование закона дисперсии и эффективной массы носителей, и на масштабах порядка нанометров частица с заданной эффективной массой движется в потенциале, определяемом геометрией наноструктуры. Наночастицы, состоящие из одного материала, с хорошей точностью могут быть описаны моделью глубокой потенциальной ямы, а эпитаксиальные наноструктуры – потенциальной ямы конечной глубины. Во всех случаях, возникает дискретный спектр, причем положение уровней определяется, в числе прочего, геометрическими размерами системы. В этом случае говорят о *размерном квантовании*.

Разумеется, в случае квантовых проволок и ям эффекты размерного квантования определяют только движение электрона вдоль направлений, в которых эти структуры имеют нанометровые размеры. В других направлениях электрон движется свободно, так что, например, спектр электронного движения в квантовой яме определяется формулой $E_n + \frac{q_{\parallel}^2}{2m^*}$, где E_n – дискретные уровни для движения в направлении, перпендикулярном плоскости ямы, а q_{\parallel} – вектор, лежащий в плоскости ямы. По этой причине квантовые ямы часто называют квазидвумерными системами, а квантовые проволоки – квазиодномерными²².

4.20 Понятие тождественных частиц. Статистики Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака

Перейдем теперь к статистике ансамблей тождественных частиц. Понятие “тождественных” частиц в классической и квантовой физике существенно различается. Дело в том, что классические частицы являются *различимыми* – в начальный момент времени классические частицы всегда можно пронумеровать (“повесить каждую из них бирку с номером”), и затем следить за траекторией каждой из них в ходе эволюции системы. В квантовой физике ситуация в корне другая, хотя бы потому, что у частиц в силу принципа неопределенности нет четких траекторий²³. Выясняется, что если речь

²²От размерности системы зависит вид плотности состояний вблизи границы разрешенной зоны. Именно, в квазиодномерной системе с квадратичным законом дисперсии плотность состояний меняется как $\theta(E)/\sqrt{E}$, в квазидвумерной $\theta(E)$, в трехмерной – как $\theta(E)\sqrt{E}$, где E – энергия, отсчитываемая от границы зоны, θ – функция Хевисайда. В качестве упражнения, попробуйте проверить эти формулы сами.

²³Если волновые функции частиц в течение эксперимента не перекрываются, вопрос об их неразличимости не важен – вычисления для “различимых” и “неразличимых частиц”

идет об одинаковых частицах (например, о фотонах или об электронах), они оказываются *неразличимы*: бессмысленно говорить о наличии “электрона номер 1 в точке r_1 и электрона номер 2 в точке r_2 ”, можно только утверждать, что в каждой из указанных точек есть по одному электрону.

Неразличимость тождественных частиц, как и уже известный нам запрет Паули – это *принцип*, то есть вывод этого утверждения из других известных формул невозможен, однако, его верность подтверждается огромным набором имеющейся экспериментальной информации. В более подробном курсе квантовой теории принцип неразличимости тождественных частиц и принцип Паули находят определенное математическое выражение²⁴.

Довольно просто убедиться, что статистика систем с различимыми и неразличимыми частицами различаются. Например, если имеются два электрона и два возможных одноэлектронных состояния, система в целом, в силу запрета Паули, может находиться в единственной конфигурации – по одному электрону в каждом из состояний. Если бы электроны были различимыми, имелось бы *две* конфигурации – первый электрон в состоянии 1, второй электрон в состоянии 2, и наоборот – второй электрон в состоянии 1, первый – в состоянии 2. Точно такая же ситуация с бозонами – для двух неразличимых бозонов число конфигураций равно 3, для различимых – 4 (проверьте это самостоятельно!)²⁵. Как вы знаете, вывод одного из основных законов статистической физики классических частиц – распределения Максвелла-Больцмана – основан на подсчете числа состояний системы, имеющих заданную энергию. Учет неразличимости частиц, как мы убедились, требует модификации этого распределения.

Действительно, статистика тождественных частиц определяется другими выражениями, которые носят название распределения Ферми-Дирака и распределения Бозе-Эйнштейна. Первое из них описывает статистику частиц с полуцелым спином (фермионов), второе – статистику частиц с целым спином (бозонов). Тому, что формулы для бозонов и фермионов разные, удивляться не приходится – наличие принципа Паули, естественно, влияет на статистику принципиальным образом.

Исторически, первой появилась статистика Бозе-Эйнштейна. В то время никому не известный индийский физик Бозе занимался вопросом формального вывода формулы Планка из стат. физических соображений. Если описывать газ фотонов посредством распределения Максвелла-Больцмана, формулу Планка получить не удастся. Бозе понял, что искомые выражения можно получить, если принять, что фотоны неразличимы, и соответствующим образом модифицировать формулу для распределения. Свои результаты он изложил в письме, отправленном Эйнштейну с просьбой рекомендовать их для публикации в одном из физических журналов. Эйнштейн был настолько воодушевлен результатом Бозе, что взял на себя труд перевести

приводят к одним и тем же результатам.

²⁴Речь идет о перестановочной симметрии многочастичной волновой функции и о возможности ввести аппарат *вторичного квантования*.

²⁵Интересно отметить, что если конфигурации равновероятны, то для системы “две частицы, два состояния” вероятность обнаружить две классических частицы в одном и том же состоянии оказывается равна 1/2, а два бозона – 2/3 (проверьте!). Тот факт, что для тождественных бозонов вероятность встретить много бозонов в одном состоянии больше, чем для классических частиц, иногда интерпретируют как “стремление бозонов оказаться в одинаковом состоянии”. Такое “стремление” в действительности, как мы видим, имеет чисто комбинаторную природу.

присланный текст на немецкий язык, бывший в то время основным для физического сообщества, и отправил статью в ведущий в то время физический журнал *Zeitschrift fur Physik*. В дальнейшем, Эйнштейн опубликовал несколько собственных работ по этой теме.

Для вывода распределений Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака проще всего рассмотреть статистику одного состояния j , попав на которое частицы приобретают энергию ϵ_j и которое может обмениваться частицами с содержащим большое количество частиц резервуаром ²⁶ (термостатом). На то, чтобы удалить частицу из термостата, требуется некоторая энергия, которую называют *химическим потенциалом* и традиционно обозначают символом μ . Таким образом, перемещение одной частицы из термостата в состояние j сопровождается изменением полной энергии системы на величину $\epsilon_j - \mu$, а перемещение n частиц – соответственно, на величину $n(\epsilon_j - \mu)$. Для заданной температуры вероятность обнаружить в рассматриваемом состоянии n , соответственно,

$$p_j(n) = Z_j^{-1} \exp\left(-\frac{n(\epsilon_j - \mu)}{kT}\right),$$

где Z_j обеспечивает выполнение условия нормировки $\sum_n p_j(n) = 1$.

В случае фермионов, в соответствии с принципом Паули возможно всего два состояния, $n = 0$ и $n = 1$. Соответственно, получается $Z_j = 1 + \exp\left(-\frac{\epsilon_j - \mu}{kT}\right)$ и, соответственно ²⁷, $p_j(0) = \left(1 + \exp\left(-\frac{\epsilon_j - \mu}{kT}\right)\right)^{-1}$, $p_j(1) = \left(1 + \exp\left(\frac{\epsilon_j - \mu}{kT}\right)\right)^{-1}$. Среднее число фермионов в состоянии $\langle n_j \rangle = \sum_n n p_j(n)$ очевидным образом совпадает с $p_j(1)$, так что

$$\langle n_j \rangle_{\text{Fermi}} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon_j - \mu}{kT}\right) + 1}. \quad (4.36)$$

Выписанные выражения и определяют статистику Ферми-Дирака.

Рассмотрим теперь случай бозонов. Число бозе-частиц в заданном состоянии может быть произвольным. Для вычисления Z_j при этом требуется суммирование геометрической прогрессии. Все вычисления вполне аналогичны тем, которые мы производили при расчете термодинамики гармонического осциллятора. Получается $Z_j = \left(1 - \exp\left(-\frac{\epsilon_j - \mu}{kT}\right)\right)^{-1}$, и расчет по формуле $\langle n_j \rangle = \sum_n n p_j(n) = -\frac{\partial \ln Z_n}{\partial ((\epsilon_j - \mu)/kT)}$ для статистики Бозе-Эйнштейна дает

$$\langle n_j \rangle_{\text{Bose}} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon_j - \mu}{kT}\right) - 1}. \quad (4.37)$$

Отдельного анализа заслуживает случай малого, по сравнению с единицей, $\langle n_j \rangle$. В этом случае, с максимальной вероятностью, в состоянии j частиц нет, с небольшой вероятностью в нем находится одна частица, а

²⁶То есть, речь идет о вычислении среднего по *большому каноническому ансамблю*.

²⁷Обратите внимание, что $p_j(0)$ и $p_j(1)$ совпадают с точностью до знака перед $\epsilon_j - \mu$. Смена знака энергии соответствует переходу к описанию в терминах дырок, при этом $p_j(0)$ соответствует наличию дырки в состоянии j , а $p_j(1)$ – отсутствию.

вероятность обнаружить две или больше частицы (в случае бозонов) пренебрежимо мала. Физическая разница между бозонами, фермионами и классическими частицами при этом должна пропадать, поскольку как принцип Паули, так и неразличимость частиц очевидным образом важны только для статистики конфигураций, включающих более одной частицы. И действительно, как для бозонов, так и для фермионов, случай $\langle n_j \rangle \ll 1$ соответствует возможности пренебречь единицей в знаменателе по сравнению с экспонентой, так что получается классическая формула, носящая название распределения Максвелла-Больцмана:

$$\langle n_j \rangle \ll 1 = \exp\left(-\frac{\epsilon_j - \mu}{kT}\right). \quad (4.38)$$

4.21 Понятие о Бозе-Эйнштейновской конденсации

Рассмотрим распределение Бозе-Эйнштейна несколько более подробно. Прежде всего, поскольку среднее число частиц в каком-либо состоянии не может быть отрицательным, из формулы (??) химический потенциал μ не может быть меньше, чем минимальная величина энергии уровней ϵ_i . В то же время, как мы сейчас увидим, в определенных случаях он оказывается *в точности равным* минимальному ϵ_i . Формально, это соответствует бесконечно большому числу частиц в соответствующей моде. Фактически, речь идет о *макроскопически большом*, то есть, сравнимом с числом Авогадро, числе частиц макроскопической системы. Случай макроскопически большого числа заполнения для одной из мод системы называют *бозе-эйнштейновской конденсацией*.

Для реализации бозе-эйнштейновской конденсации необходимо, чтобы число частиц в системе было определенным. То есть, например, газ фотонов в полости не подходит – фотоны рождаются и исчезают при взаимодействии со стенками полости. Кроме того, понятие фотона с нулевой частотой не определено. Годится же, в частности, ансамбль тождественных атомов, обладающих целочисленными спинами.

В случае, если число частиц задано, существование конденсата следует из аргумента, впервые сформулированного Эйнштейном. Рассмотрим случай очень низкой температуры. Тогда все числа заполнения, соответствующие положительным $\epsilon_i - \mu$, в соответствии с формулой для распределения Бозе-Эйнштейна, оказываются экспоненциально малы. Поскольку, с другой стороны, сумма чисел заполнения для всех мод есть полное число частиц в системе, мы приходим к выводу, что большинство частиц находится в состоянии с минимальной энергией, для которого $\epsilon_i = \mu$.

Реальные системы отличаются от рассмотренной модели прежде всего взаимодействием частиц друг с другом. Из-за этого, бозе-эйнштейновская конденсация имеет место далеко не для всех систем. Тем не менее, реализовать ее удается, и это оказывается чрезвычайно интересно ввиду необычных свойств конденсата. Их анализ и описание выходит далеко за рамки нашего курса. Тем не менее, нельзя не упомянуть, что в некоторых случаях конденсат обладает свойством *сверхтекучести*, то есть он способен двигаться без трения. Свойство сверхтекучести было впервые обнаружено у

жидкого гелия (П.Л.Капица, 1938) и объяснено с использованием представлений о бозе-эйнштейновском конденсате атомов He^4 (Л.Д.Ландау, 1939). С бозе-эйнштейновской конденсацией особых квазичастиц – *куперовских пар* – связано широко известное явление *сверхпроводимости*. В последнее время, активно исследовался конденсат, образующийся в газе атомов щелочных металлов, охлажденном до сверхнизких (сотни нанокельвинов) температур.

4.22 Распределение Ферми-Дирака в вырожденном случае

Наконец, рассмотрим некоторые свойства распределения Ферми-Дирака. В этом случае из формулы (??) не вытекает никаких ограничений на величину химического потенциала – числа заполнения в любом случае остаются положительными.

Рассмотрим вначале случай нулевой (очень малой) температуры. При этом, как несложно проверить, распределение Ферми-Дирака переходит в ступенчатую функцию, так что воспроизводится ожидаемая картина: числа заполнения равны единице для состояний с энергией, меньшей значения химического потенциала, и нулю – для состояний, лежащих выше. Значение химического потенциала определяется полным числом частиц в системе.

При повышении температуры, ступенчатая функция размывается – в области с шириной порядка kT числа заполнения существенным образом отличаются от нуля и единицы. Газ фермионов называют *вырожденным*, если величина kT много меньше, чем величина химического потенциала, то есть, если область размытия мала по сравнению с другими характерными масштабами на шкале энергий. Вырожденным, в частности, является газ электронов металлов при комнатной температуре – “комнатная” величина $kT \approx 0.03\text{eV}$ много меньше “твердотельных” масштабов (единицы электрон-вольт).

Если вблизи μ система обладает непрерывным спектром (это верно, например, для электронов металлов), то в области с шириной порядка kT вырожденного ферми-газа находится $\propto A(\mu)kTL^3$ частиц, где L^3 – объем системы, а $A(\mu)$ – *плотность состояний*, то есть число состояний непрерывного спектра системы, отнесенное к объему системы, в элементарном интервале энергий (мы уже сталкивались с этой величиной, когда рассматривали количество фотонных мод в заданном спектральном интервале).

Несложно подсчитать, например, как энергия такой системы зависит от температуры. В качестве начала отсчета возьмем энергию при температуре, равной нулю. Тогда средняя энергия для системы конечной температуры равна

$$E - E_0 = \sum_j \epsilon_j (\langle n_j(T) \rangle - n_j(T=0)) = L^3 \int \epsilon A(\epsilon) (\langle n_\epsilon(T) \rangle - n_\epsilon(T=0)) d\epsilon. \quad (4.39)$$

Для вырожденной системы $A(\epsilon)$ можно заменить на $A(\mu)$ и вынести за знак интеграла. Интеграл распадается на две части – область $\epsilon > \mu$ и $\epsilon < \mu$. Рассмотрим первую из них; в ней $n_\epsilon(T=0) = 0$ и мы получаем $\int_0^\infty \frac{\epsilon}{1+e^{\epsilon/kT}} d\epsilon = (kT)^2 \int_0^\infty \frac{x}{1+e^x} dx$. Точное значение интеграла нам не очень

важно — это некоторый численный коэффициент²⁸. Для области $\epsilon < \mu$ (проверьте!) ответ получается точно таким же. Таким образом,

$$E - E_0 \propto (kT)^2 A(\mu) L^3. \quad (4.40)$$

Отсюда, в частности, следует, что связанная с электронами проводимости составляющая теплоемкости металлов линейно зависит от температуры: $\frac{dE}{dT} \propto kT$.

²⁸Интеграл, разумеется, можно вычислить точно — получается $\frac{\pi^2}{12}$.

Глава 5

Квантовая электроника

5.1 Уравнение Шредингера с переменным внешним полем. Теория возмущений

Квантовая электроника – наука о взаимодействии квантовых объектов и внешних полей. В рамках курса нас будут интересовать переходы между уровнями атомов и молекул, происходящие спонтанно или под действием внешнего электрического поля. В качестве последнего часто выступает поле электромагнитной волны.

Рассмотрим некоторую систему (например, атом), на которую действует внешнее поле, периодически меняющееся во времени. Уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H}\psi + \hat{V}(t)\psi, \quad (5.1)$$

где \hat{H} – гамильтониан системы в отсутствие внешнего поля, а $\hat{V}(t)$ – оператор взаимодействия с полем. Определим вид оператора $\hat{V}(t)$ для электрона атома, взаимодействующего с электрическим полем $E(t)$ световой волны. Поскольку длина световой волны много больше размеров атомов (напомним, отношение этих величин по порядку определяется величиной постоянной тонкой структуры), электрическое поле оптической волны на масштабах атома можно считать пространственно однородным. Оператор взаимодействия есть фактически оператор энергии электрона в потенциале внешнего поля, то есть

$$\hat{V}(t) = -eE(t)\hat{x}, \quad (5.2)$$

где поле E мы считаем направленным вдоль оси x . Для монохроматической волны

$$E(t) = Ee^{-i\omega t} + E^*e^{i\omega t}. \quad (5.3)$$

Отметим, что уравнение Шредингера с зависящим от времени потенциалом в ходе курса встречается нам впервые. Для его решения будем искать волновую функцию в виде

$$\psi(r, t) = \sum_j a_j(t)\psi_j(r)e^{-i\epsilon_j t/\hbar}, \quad (5.4)$$

где $\psi_j(r)$ и ϵ_j – волновые функции и энергии уровней стационарной задачи $\epsilon\psi(r) = \hat{H}\psi(r)$, а $a(t)$ – коэффициенты разложения по этим функциям. Поскольку ψ_j образуют полный ортонормированный базис, с математической точки зрения указанное разложение пригодно для описания любой зависимости $\psi(r, t)$. Но его смысл также ясен и физически. Именно, для произвольного набора a_j , не зависящих от времени, (5.4) удовлетворяет нестационарному уравнению Шредингера (5.1) в отсутствие внешнего поля. Иными словами, наличие внешнего поля приводит к зависимости величин коэффициентов разложения от времени. Это несложно показать и формально. Подставим разложение (5.4) в уравнение Шредингера (5.1)

$$\sum_j (\epsilon_j a_j(t) + i\hbar \dot{a}_j(t))\psi_j(r)e^{-i\epsilon_j t/\hbar} = \sum_j a_j(t)e^{-i\epsilon_j t/\hbar}(\hat{H} + \hat{V}(t))\psi_j(r) \quad (5.5)$$

Поскольку ψ_j и ϵ_j – собственные функции и энергии стационарной задачи, $\hat{H}\psi_j = \epsilon_j\psi_j$, часть слагаемых сокращается. Остается

$$\sum_j i\hbar\dot{a}_j(t)\psi_j(r)e^{-i\epsilon_j t/\hbar} = \sum_j a_j(t)e^{-i\epsilon_j t/\hbar}\hat{V}(t)\psi_j(r). \quad (5.6)$$

Домножим обе части на $\psi_{j'}^*$, с некоторым индексом j' , после чего проинтегрируем по координатам. Учитывая, что $\int \psi_{j'}^*\psi_j d^3r = \delta_{jj'}$ и используя bra-ket нотацию $\int \psi_{j'}^*\hat{V}(t)\psi_j d^3r = \langle j'|\hat{V}(t)|j \rangle$, получаем

$$i\hbar\dot{a}_{j'}(t) = \sum_j \langle j'|\hat{V}(t)|j \rangle a_j(t)e^{-i(\epsilon_j - \epsilon_{j'})t/\hbar}. \quad (5.7)$$

(в левой части, из-за наличия δ -символа, от суммы осталось единственное слагаемое; уравнение домножили на $e^{i\epsilon_{j'}t/\hbar}$).

Вплоть до настоящего момента никаких приближений не делалось – уравнение (5.7) математически эквивалентно исходному уравнению Шредингера (5.1). Сейчас настало время допустить, что *внешнее воздействие является слабым* в том смысле, что его влияние может быть описано в рамках *теории возмущений*. В качестве исходного приближения (нулевой порядок теории возмущений) мы рассмотрим систему, находящуюся в каком-либо из стационарных состояний невозмущенной задачи, которое мы обозначим как j_0 : $a_j^{(0)} = \delta_{j,j_0}$ (напомним, что для невозмущенной задачи коэффициенты a_j не зависят от времени). В первую очередь, конечно, имеется в виду ситуация, когда j_0 является основным состоянием. Предположение о слабости возмущения математически означает, что $V(t)$ содержит некоторый малый параметр. Тогда, подставляя $a_j^{(0)}$ в правую часть (5.7), получаем уравнение, позволяющее определить поправки к a_j в первом порядке по величине возмущения:

$$i\hbar\dot{a}_{j'}^{(1)}(t) = \sum_j \langle j'|\hat{V}(t)|j \rangle a_j^{(0)}e^{-i(\epsilon_j - \epsilon_{j'})t/\hbar}. \quad (5.8)$$

Поскольку $a_j^{(0)} = \delta_{j,j_0}$, получаем

$$i\hbar\dot{a}_{j'}^{(1)}(t) = \langle j'|\hat{V}(t)|j_0 \rangle e^{-i(\epsilon_j - \epsilon_{j'})t/\hbar}. \quad (5.9)$$

В принципе, найдя из этого уравнения $a^{(1)}$, можно записать аналогичное уравнение для поправки второго порядка, и так далее. Мы ограничимся только формулами первого порядка.

Учтем, что оператор возмущения зависит от времени по гармоническому закону, в соответствии с формулой (5.3). Из двух комплексных экспонент мы учтем только $e^{-i\omega t}$, то есть положим $\hat{V}(t) = \hat{V}e^{-i\omega t}$ (при желании, второе слагаемое можно рассмотреть полностью аналогично). Будем считать, что возмущение начало действовать в момент времени $t = 0$. Интегрирование проводится элементарно и дает

$$a_{j'}^{(1)}(t) = \langle j'|\hat{V}|j_0 \rangle \frac{e^{-i(\hbar\omega + \epsilon_{j_0} - \epsilon_{j'})t/\hbar} - 1}{\hbar\omega + \epsilon_{j_0} - \epsilon_{j'}}. \quad (5.10)$$

Нас будет интересовать вероятность перехода системы в состояние j' под действием возмущения. Вероятность обнаружить систему в состоянии j' определяется квадратом модуля $a_{j'}$, равного

$$|a_{j'}^{(1)}(t)|^2 = |(\langle j' | \hat{V} | j_0 \rangle)|^2 \frac{|1 - e^{-i(\hbar\omega + \epsilon_{j_0} - \epsilon_{j'})t/\hbar}|^2}{(\hbar\omega + \epsilon_{j_0} - \epsilon_{j'})^2}. \quad (5.11)$$

Видно, что при наличии возмущения с частотой, не попадающей точно в резонанс (то есть, если $\hbar\omega \neq \epsilon_{j'} - \epsilon_{j_0}$), рассматриваемая величина совершает некоторые осцилляции. Иногда говорят о *виртуальных переходах*, в процессе которых атом переходит в состояние j' , а затем возвращается в исходное состояние. Тот факт, что в нерезонансном случае атом переходит в возбужденное состояние только временно, можно понять, описывая действующее на атом излучение в терминах потока фотонов с определенной энергией $\hbar\omega$. Из закона сохранения энергии следует, что атом может поглотить такой фотон и перейти в другое состояние и остаться в нем, только если разность конечной и начальной энергии атома в точности равна энергии поглощаемого фотона (то есть, в случае точного резонанса). Однако, в нерезонансном случае возможны переходы, при которых атом переходит в возбужденное состояние на конечный промежуток времени, поскольку в этом случае энергия имеет неопределенность, тем большую, чем это время меньше¹.

5.2 Случай точного резонанса. Вынужденные переходы. Золотое правило Ферми

Рассмотрим теперь случай точного резонанса. Непосредственно выражение (5.11) при $\hbar\omega = \epsilon_{j'} - \epsilon_{j_0}$ неприменимо, поскольку, как мы увидим ниже, решение для резонансного случая характеризуется другим видом зависимости от времени. Здесь уместно привести аналогию с классическим гармоническим осциллятором, на который действует осциллирующая во времени внешняя сила. Если частота внешней силы не является резонансной, осциллятор совершает вынужденные гармонические колебания $x(t) \propto \cos \omega t$; в случае же точного резонанса, решение имеет вид $x(t) \propto t \cos \omega t$.

Однако, посредством определенного предельного перехода из формулы (5.11) все-таки можно получить выражения, подходящие для описания точного резонанса в случае, когда *конечное состояние j' принадлежит непрерывному спектру*. Тождественно преобразуем (5.11)

$$|a_{j'}^{(1)}(t)|^2 = \frac{t}{\hbar} |(\langle j' | \hat{V} | j_0 \rangle)|^2 \frac{|1 - e^{-i(\epsilon_{j_0} - \epsilon_{j'})t/\hbar}|^2}{(\hbar\omega + \epsilon_{j_0} - \epsilon_{j'})^2 t/\hbar}. \quad (5.12)$$

и покажем, что в пределе больших времен

$$\frac{|1 - e^{-i(\epsilon_{j_0} - \epsilon_{j'})t/\hbar}|^2}{(\hbar\omega + \epsilon_{j_0} - \epsilon_{j'})^2 t/\hbar} \propto \delta(\hbar\omega + \epsilon_{j_0} - \epsilon_{j'}). \quad (5.13)$$

¹В этом рассуждении мы неявно предполагали, что с атомом в заданный момент взаимодействует только один фотон. Это предположение верно для задач *линейной оптики*, когда поле световой волны является достаточно слабым. Полученное нами выражение в нерезонансном случае $\hbar\omega \neq \epsilon_{j'} - \epsilon_{j_0}$ описывает *линейную поляризацию* атома переменным внешним полем.

Это выражение имеет простой физический смысл – δ -функция соответствует закону сохранения энергии, а линейная зависимость от времени выражает тот факт, что с течением времени все большее и большее количество частиц оказываются в возбужденном состоянии. Последнее утверждение полностью соответствует интуитивно ожидаемой картине, когда имеется некоторая (малая) вероятность поглощения фотона атомом, и вероятность поглотить *какой-нибудь* фотон прямо пропорциональна количеству фотонов, пролетевших атом за время наблюдения.

Для того, чтобы показать, что рассматриваемое выражение действительно пропорционально δ -функции, необходимо прежде всего установить, что интеграл

$$\int \frac{|1 - e^{-i(\xi t/\hbar)}|^2}{\xi^2 t/\hbar} d\xi \quad (5.14)$$

в пределе больших времен стремится к конечному пределу. Это легко понять, перейдя к переменной интегрирования $\xi t/\hbar$ – сразу становится ясно, что результат интегрирования от t вообще не зависит. В то же время, интеграл не равен нулю, так как подынтегральное выражение положительно. Далее, несложно убедиться, что в пределе $t \rightarrow \infty$ вклад в интеграл вносит только малая окрестность $\xi = 0$ – в остальной области подынтегральное выражение мало. Выполнение этих двух условий (стремление интеграла к конечному пределу и тот факт, что результат интегрирования определяется малой окрестностью нуля) и позволяет нам говорить, что рассматриваемое выражение пропорционально δ -функции. Коэффициент пропорциональности есть значение (5.14). Его вычисление приводит к формуле

$$|a_{j'}^{(1)}(t)|^2 = \frac{2\pi t}{\hbar} |(\langle j' | \hat{V} | j_0 \rangle)|^2 \delta(\hbar\omega + \epsilon_{j_0} - \epsilon_{j'}). \quad (5.15)$$

Вероятность перехода в единицу времени, соответственно, равна

$$W_{j_0 \rightarrow j'} = \frac{2\pi}{\hbar} |(\langle j' | \hat{V} | j_0 \rangle)|^2 \delta(\hbar\omega + \epsilon_{j_0} - \epsilon_{j'}). \quad (5.16)$$

Эта формула известна как *золотое правило Ферми*. Напомним, что в случае атома в поле оптической волны $\hat{V} = -eE\hat{x}$, так что фактически формула содержит квадрат модуля матричного элемента координаты и квадрат модуля напряженности поля. Последняя величина пропорциональна интенсивности оптического излучения, то есть, количеству фотонов, падающих на атом в единицу времени.

Как уже было сказано, золотое правило Ферми используется для определения скорости перехода *в состоянии непрерывного спектра*. Действительно, если энергия фотона достаточна, чтобы выбить электрон из атома (то есть, перевести его в состояние непрерывного спектра), условие точного резонанса всегда выполнится для какого-нибудь уровня именно потому, что уровни расположены непрерывно.

5.3 Спонтанные переходы. Коэффициенты Эйнштейна

Для резонансных переходов же между различными атомными уровнями (в пределах дискретного спектра) золотое правило Ферми подходит плохо – в

отсутствие резонанса δ -функция обращается в нуль, а в точном резонансе получается бесконечность. Последнее обстоятельство просто означает, что в случае точного резонанса неприменимо приближение слабого поля. В этом случае более уместно использовать приближение двухуровневой системы. Задача о переходах в двухуровневой системе под действием почти резонансного поля рассмотрена в дополнительных материалах к этой главе.

Зато золотое правило Ферми годится для описания переходов между уровнями дискретного спектра при учете *конечной спектральной ширины внешнего поля*, то есть если действующее на атом излучение содержит фотоны, энергии которых распределены в некотором спектральном интервале. Хотя это, в принципе, не сложно, мы не будем получать соответствующие выражения микроскопической теории, а ограничимся феноменологическим рассмотрением, которое предложил А. Эйнштейн (1916). Нам важно поговорить о подходе Эйнштейна, в том числе, потому что он позволяет принять во внимание эффект, не включенный в проведенное выше рассмотрение – возможность *спонтанных* переходов, при которых находящийся в возбужденном состоянии атом высвечивает фотон и переходит на нижележащий уровень *без влияния* внешнего поля.

Рассмотрим, для простоты, атом, содержащий всего два уровня – основной (состояние $|0\rangle$) и возбужденный (состояние $|1\rangle$), во внешнем поле со спектральной интенсивностью $u(\omega)$ (использование спектральной интенсивности и означает, что мы работаем с монохроматическим полем, содержащим фотоны с различными энергиями). Если атом находится в основном состоянии, он может перейти в возбужденное, поглотив фотон резонансной частоты $\omega_{10} = (\epsilon_1 - \epsilon_0)/\hbar$. Скорость таких переходов пропорциональна количеству резонансных фотонов, то есть, пропорциональна $u(\omega_{10})$. Коэффициент пропорциональности обозначим как B_{01} . Если же атом находится в возбужденном состоянии, он может перейти в основное как по воздействию внешнего поля, так и спонтанно. В первом случае, скорость перехода пропорциональна $u(\omega_{10})$; коэффициент пропорциональности мы обозначим B_{10} . Скорость спонтанного перехода от внешнего поля не зависит², ее мы будем описывать посредством коэффициента A .

Суть результата, полученного Эйнштейном, состоит в том, что коэффициенты B_{01} , B_{10} и A не независимы. Для того, чтобы установить связь между этими величинами, Эйнштейн рассматривает набор атомов, находящихся в термодинамическом равновесии с газом фотонов. Существование равновесия означает, что в единицу времени из состояния $|0\rangle$ в состояние $|1\rangle$ переходит столько же атомов, сколько из состояния $|1\rangle$ в состояние $|0\rangle$. Количество переходов $0 \rightarrow 1$ есть произведение скорости этих переходов на количество атомов в состоянии $|0\rangle$, то есть, в соответствии с определением коэффициента B_{01} , это количество равно $N_0 B_{01} u(\omega_{10})$. Количество переходов $1 \rightarrow 0$ определяется аналогично, только следует еще учесть возможность спонтанных переходов. Получается $N_1 (B_{10} u(\omega_{10}) + A)$. Соответственно, условие равновесности системы означает

$$N_0 B_{01} u(\omega_{10}) = N_1 (B_{10} u(\omega_{10}) + A). \quad (5.17)$$

²Для интересующихся заметим, что спонтанные переходы могут быть описаны как результат присутствия *нулевых колебаний* фотонных степеней свободы, то есть отличия от нуля неопределенности электрического поля в основном состоянии (с энергией $\hbar\omega/2$) каждой из фотонных мод.

Формулу для спектральной плотности фотонного газа при заданной температуре мы получали, когда выводили формулу Планка (см. формулу (16) Лекции 6):

$$u(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (5.18)$$

Кроме того, из того, что система находится в термодинамическом равновесии, следует, что отношение количества атомов в состояниях $|0\rangle$ и $|1\rangle$ определяется распределением Больцмана:

$$\frac{N_1}{N_0} = e^{-(\epsilon_1 - \epsilon_0)/kT}. \quad (5.19)$$

Рассмотрим вначале случай очень большой температуры, при котором $N_0 = N_1$, а спектральная плотность $u(\omega_{10})$ стремится к бесконечности. Тогда из (5.17), ввиду конечности A , сразу следует, что

$$B_{10} = B_{01},$$

так что индексы у B можно опустить, и (5.17) после подстановки отношения N_1/N_0 , принимает вид

$$u(\omega_{10})B(1 - e^{-(\epsilon_1 - \epsilon_0)/kT}) = Ae^{-(\epsilon_1 - \epsilon_0)/kT}. \quad (5.20)$$

Подставляя теперь $u(\omega_{10})$, получаем

$$A = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B,$$

то есть коэффициенты Эйнштейна линейно связаны.

Абсолютная величина коэффициентов Эйнштейна, как видно из предыдущих расчетов, определяется (в главном порядке) квадратом матричного элемента координаты $|\langle 1|x|0\rangle|^2$.

5.4 Лазеры

Представление о вынужденном излучении позволяет понять природу практически важного явления — *оптического усиления в средах с инверсией населенностей*. Рассмотрим ансамбль, в котором количество атомов, находящихся в возбужденном состоянии, превышает количество атомов, находящихся в основном. Именно такая ситуация и называется инверсией населенностей. Поскольку коэффициенты Эйнштейна для поглощения и для вынужденного излучения равны, $B_{10} = B_{01}$, распространяющийся в среде с инверсией населенностей фотон с большей вероятностью взаимодействует с возбужденными атомами, чем с невозбужденными. Взаимодействие фотона с возбужденным атомом индуцирует вынужденный переход в основное состояние с испусканием еще одного фотона, а с невозбужденным — поглощение фотона. Таким образом, при распространении света в среде с инверсией населенностей количество фотонов в среднем *увеличивается*. Важной характеристикой процесса вынужденного излучения является *идентичность* вынуждающего и испущенного фотонов — испускаемый фотон имеет то же направление распространения, фазу и поляризацию, что и

“исходный”. Таким образом, проходящий через среду с инверсией населенностей оптический сигнал *усиливается*, при этом факт усиления сигнала не влияет непосредственно на прочие его характеристики.

Разумеется, как это следует из формул для распределения Больцмана, инверсия населенностей не может быть реализована в термодинамически равновесном случае. Для практической реализации инверсии населенностей необходимо присутствие внешнего источника энергии – *накачки*. Проще всего описать формирование инверсии населенностей в ансамбле трехуровневых атомов с оптической накачкой.

Рассмотрим систему атомов, в дискретном спектре которых присутствуют три уровня: основной уровень 0, первый возбужденный 1 и второй возбужденный 2. При этом, инверсия населенностей реализуется в системах с *метастабильным* первым возбужденным уровнем – коэффициенты Эйнштейна для переходов между уровнями 1 и 0 должны быть много меньше, чем для переходов между уровнями 0,2 и 1,2 (из полученных ранее формул мы можем заключить, что это эквивалентно сильному неравенству для матричных элементов координаты). Пусть накачка вызывает переходы с уровня 0 на верхний возбужденный уровень 2 (и, соответственно, обратные переходы с уровня 2 в основное состояние). Тогда, попавшие в состояние 2 атомы могут спонтанно перейти в состояние 1. Поскольку состояние 1 является метастабильным, спонтанные переходы из него в основное состояние практически не происходят, так что атомы в состоянии 1 накапливаются, и возникает инверсия населенностей. Такая система усиливает свет, фотоны которого имеют энергию $E_1 - E_0$.

Эффект усиления света в средах с инверсией населенностей лежит в основе принципа работы лазеров. Фактически лазер представляет собой оптический резонатор с усилением. В качестве резонатора, как правило, выступает промежуток между двумя зеркалами, а усиление обеспечивает среда с инверсией населенностей, расположенная между ними. В качестве исходного излучения выступают единичные фотоны, рожденные в результате спонтанного излучения. Отражаясь от зеркал, свет многократно проходит через усиливающую среду и его интенсивность может достигать весьма больших значений, определяемых мощностью накачки и другими параметрами лазера. Фактически, возникает *генерация* – интенсивность выходного излучения определяется свойствами резонатора и практически не зависит от “затравочного” сигнала.

Излучение лазеров характеризуется высокой когерентностью – его частотный спектр представляет собой узкую линию, а пространственная расходимость луча во многих случаях настолько мала, насколько это позволяет дифракционный предел. В настоящее время доступны разнообразные лазеры, в том числе перестраиваемые по частоте, работающие в непрерывном или импульсном режиме. В последнем случае длительность импульса может насчитывать всего несколько периодов колебаний поля световой волны.

Единственное существенное ограничение для лазеров, основанных на средах с инверсией населенностей – диапазон спектра, в котором лежит выходное излучение. Поскольку речь идет о переходах между электронными состояниями либо состояниями колебательного спектра молекул, усиление оптического сигнала за счет инверсии населенностей реализуется только в видимом, ближнем УФ и ИК диапазоне.

5.5 Переходы в непрерывном спектре. Синхротронное излучение и лазер на свободных электронах

Гораздо более широкую спектральную область, от миллиметрового до рентгеновского диапазона (то есть, 6-8 порядков на шкале частот электромагнитных колебаний), позволяют перекрыть источники, основанные на переходах между состояниями непрерывного электронного спектра – так называемые *лазеры на свободных электронах*. В основе их устройства лежит феномен *синхротронного излучения*.

Синхротронным называют излучение ультррелятивистских электронов, движущихся в магнитном поле. Сам по себе факт излучения света движущимся в магнитном поле зарядом не вызывает удивления – на этот заряд действует сила Лоренца, соответственно, заряд движется непрямолинейно и, соответственно, излучает электромагнитные волны. Спектр излучения этих волн для нерелятивистских электронов, для экспериментально реализуемых значений магнитного поля, лежит в СВЧ диапазоне. Переход к ультррелятивистскому случаю не меняет физики дела, однако, приводит к радикальному изменению масштаба частоты задачи: формулы содержат квадрат фактора Лоренца $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-V^2/c^2}} \equiv \frac{m}{m_0}$ (одна степень γ возникает из-за релятивистского сокращения длины, другая – из-за эффекта Доплера). Поэтому, используя в качестве источника электронов синхротрон, при тех же величинах магнитного поля можно обеспечить излучение не в СВЧ, а в рентгеновском диапазоне. Разумеется, используя потоки электронов меньшей энергии или меньшее по величине поле, несложно перейти в УФ диапазон и ниже по шкале частот.

Синхротронное излучение является ненаправленным и широкополосным. Для того, чтобы обеспечить генерацию направленного луча в узкой полосе спектра, пучок электронов пропускают через цепочку магнитов с чередующимся направлением поля. В этом случае, появляется четко определенное значение частоты – частота, с которой электроны проходят периоды такой цепочки, и направление, совпадающее с направлением распространения луча.

Более того, возникает механизм, в чем-то аналогичный вынужденному излучению света возбужденными атомами: отклоняемый магнитным полем электрон с большей вероятностью испускает фотон, если это отклонение происходит в присутствии другого фотона. Иными словами, фаза испущенных фотонов коррелирует с характеристиками пучка электронов, так что излучение, испущенное при проходе первых магнитов в направлении распространения пучка, в дальнейшем усиливается. Выходящее излучение называется когерентным. Описанное устройство и представляет собой *лазер на свободных электронах*.

Как уже было сказано, такие лазеры позволяют перекрыть чрезвычайно широкий спектральный диапазон, недостижимый для обычных лазеров на средах с инверсией населенностей. Наиболее важной является возможность генерации высокочастотного (рентгеновского и дальнего УФ) излучения. При этом, элементарно обеспечивается перестройка частоты выходного излучения. Основными недостатками лазеров на свободных электронах в на-

стоящее время является крайне высокая цена и большой размер.

Дополнительный материал и задачи для семинарских занятий

5.А Переходы под действием внешнего поля

1. Найти вероятность перехода системы с основного уровня на возбужденный под действием двух коротких импульсов возмущения $V(t) = W\{\delta(t) + \delta(t - \tau)\}$ ($W \ll \hbar$).

2. Найти зависимость от времени вероятности перехода системы с одного уровня на другой под действием гармонического возмущения $\hat{V} \cos \omega t$, попадающего почти в резонанс с частотой перехода между этими уровнями.

Решение. В резонансном случае близости частоты возмущения к частоте перехода между двумя уровнями можно пренебречь всеми прочими уровнями и рассматривать систему как двухуровневую. ВФ в этом случае имеет вид $\psi(t) = a(t)\varphi_a(r)e^{-i\omega_a t} + b(t)\varphi_b(r)e^{-i\omega_b t}$. Уравнения, описывающие эволюцию коэффициентов разложения ВФ имеют вид

$$i\hbar \frac{da}{dt} = V_{ab}e^{i\delta t}b, \quad i\hbar \frac{db}{dt} = V_{ab}^*e^{-i\delta t}a,$$

где $\delta = \omega - (\omega_b - \omega_a)$ - резонансная расстройка, а $V_{ab} = \langle \varphi_a | \hat{V} | \varphi_b \rangle$ - матричный элемент оператора возмущения. Исключая b , получаем $\ddot{a} - i\delta\dot{a} + |V_{ab}|^2 a / \hbar^2 = 0$. Это уравнение описывает колебания на частоте, являющейся корнем квадратного уравнения $\theta^2 - \delta\theta - |V_{ab}|^2 / \hbar^2 = 0$: $\theta_{1,2} = \delta/2 \pm \Omega$, $\Omega = \sqrt{|V_{ab}|^2 / \hbar^2 + \delta^2/4}$. Решение, соответствующее начальному условию $a(0) = 1$, $b(0) = 0$ имеет вид $a(t) = e^{i\delta t/2} (\cos \Omega t - \frac{i\delta}{2\Omega} \sin \Omega t)$, $b(t) = \frac{iV_{ab}^*}{\hbar\Omega} e^{-i\delta t/2} \sin \Omega t$. Таким образом, вероятность перехода на другой уровень имеет вид $p(t) = (1 + \hbar^2 \delta^2 / 2|V_{ab}|^2)^{-1} \sin^2 \Omega t$. В случае точного резонанса $\delta = 0$ система периодически оказывается полностью во втором состоянии. Световой импульс длины $\Delta t = \pi/\Omega$ обычно называют π -импульсом.

3. Для частицы, находящейся в бесконечно высокой потенциальной яме ширины a найти скорость переходов между первыми двумя энергетическими уровнями под действием возмущения $\hat{V}(t) = -V_0 \frac{9\pi^2}{16a} \left(\frac{x}{a} - \frac{1}{2} \right)$.

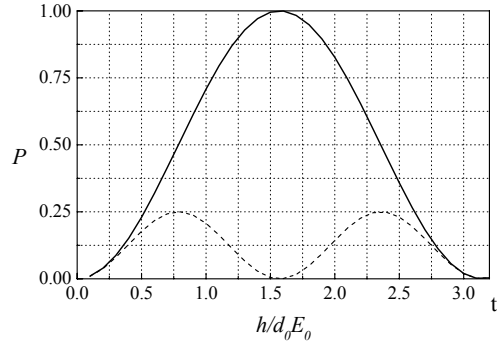


Рис. 5.1: Эволюция двухуровневой системы под действием классического заданного поля. Пунктиром отложена зависимость вероятности перехода от времени в нерезонансном случае, когда $\omega - \omega_0 = \sqrt{3}\Omega$.

Глава 6

Квантовая информация

6.1 Квантовая информация

Квантовая информация - это новая область науки и технологии, сочетающая в себе разделы физики, математики, кибернетики и инженерии. Ее целью является выяснение роли фундаментальных законов физики, открытых в XX веке в процессах получения, передачи и обработки информации. Сейчас ясно, что теория классической информации не всегда может адекватно ответить на вопрос, как информация может быть использована в реальном (физическом) - т.е. в квантовом мире. Некоторые выводы теории квантовой информации могут быть представлены как обобщение классической теории в тех случаях, когда информация передается и хранится с помощью квантовых состояний, а не в форме классических битов.

Важным аспектом в мотивации квантовых информационных технологий является то, что благодаря техническому прогрессу экспериментаторы получили доступ к единичным квантовым объектам и научились контролировать эти объекты с высокой точностью.

К настоящему времени, пожалуй, единственным практическим применением квантовой информатики является *квантовая криптография*. В этой области уже разработаны и реализованы алгоритмы, использующие свойства квантовых объектов - невозможность клонирования состояния и измерения без возмущения. Основное преимущество квантовых криптографических протоколов - даже не абсолютная их секретность (в классической криптографии существуют безусловно секретные ключи), а то, что сам факт подслушивания становится известным для пользователей, а надежность передачи информации не уменьшается, если уровень вносимых при передаче ошибок не превышает определенного уровня.

Однако, в ближайшие десятилетия квантовая информатика, по-видимому, окажется необходимой для информационных технологий в целом. Это связано с непрерывным уменьшением размеров элементов вычислительных устройств. С 1959 года, когда была создана первая микросхема, был выработан эмпирический закон (закон Мура¹), согласно которому число транзисторов в кристалле одной интегральной схемы в течение первых 15 лет удваивалось каждый год, а затем и до сих пор такое удвоение происходит за 1.5 года. Если первые кремниевые микросхемы имели



Рис. 6.1: Современное соотношение области применимости теорий классической и квантовой информации на фоне современных информационных технологий.

¹Существует много интерпретаций закона Мура - за каждые полтора года: удваивается производительность микропроцессоров; удваивается тактовая частота микропроцессоров; удваивается вычислительная мощность компьютера; удваивается плотность транзисторов на чипе; стоимость чипа падает вдвое; и др. В 2003 году Гордон Мур подсчитал, что количество транзисторов, ежегодно поставляемых на рынок в мире, достигло 10^{19} . Это в сто раз больше, чем количество муравьев на Земле...

размеры элементов в плоскости кристалла порядка десятков микрон, то современные образцы характеризуются размерами порядка 100 нм, а контроль осуществляется с точностью порядка 10 нм. Согласно закону Мура, менее чем через 20 лет размеры интегральной схемы станут порядка атомных, а, следовательно, законы их функционирования будут определяться законами микромира, т.е. квантовой механикой.

С рассмотренной выше точки зрения квантовые эффекты, связанные с малостью размеров различных устройств, воспринимаются скорее как преграда на пути к миниатюризации электронных устройств. Однако известны и схемы обработки квантовой информации, открывающие принципиально новые, по сравнению с классическими устройствами, возможности. Прежде всего, следует упомянуть *квантовый компьютер*. Это физическое устройство, выполняющее логические операции над квантовыми состояниями путем так называемых унитарных преобразований, не нарушающих квантовые суперпозиции в процессе вычислений.

Для чего нужен квантовый компьютер? Рассмотрим, например, математическую проблему факторизации больших чисел - т.е. разложения произвольного числа на простые множители. Эта задача непосредственно связана с криптографией, где секретные ключи формируются именно посредством такого алгоритма.

Математики твердо верят, хотя они и не доказали это, что для факторизации числа с N десятичными разрядами любому классическому компьютеру требуется число шагов, которое растет экспоненциально с N . Иначе говоря, добавление одного десятичного разряда к числу в общем случае умножает время, необходимое для его факторизации, на постоянный множитель. Конкретно, время растет с ростом длины N факторизируемого числа как $\exp(N^{1/3})$. Так, задача вычисления произведения двух простых чисел 521 и 809 не вызывает проблем. Однако, обратная задача - нахождение простых сомножителей числа 421489 потребует заметного времени.

Таким образом, при увеличении числа разрядов задача быстро становится неразрешимой. Наибольшее число, которое по состоянию на 2011 год было разложено на простые множители в качестве математического соревнования, т.е. число, чьи простые множители были тайне выбраны математиками, чтобы составить задачу для других математиков, состояло из 129 разрядов. Если же число разрядов окажется порядка 1000, то никто не знает, как решить эту задачу с помощью используемых в настоящее время вычислительных средств. Однако, утверждение об экспоненциальном росте требуемого количества операций относится только к классическим системам. Для квантовых вычислений известен алгоритм Шора (P.Shor, 1994), который в теории позволяет решить задачу факторизации больших чисел за долю секунды². Невыполнимость факторизации лежит в основе наиболее надежных на сегодняшний день методов шифрования (в частности системы RSA - Rivest, Shamir, Adleman), которая используется для защиты электронных банковских счетов. Когда (и если) будет построена машина для квантовой факторизации, все такие криптографические системы станут абсолютно бесполезны.

²Трудности с практической реализацией таких вычислений связаны, в частности, с проблемой потери информации из-за взаимодействия квантового компьютера с остальным миром. По-видимому, для обеспечения работоспособности квантового компьютера это взаимодействие должно быть экспоненциально мало по длине факторизируемого числа.

6.2 Кубиты

Мы рассмотрим некоторые простейшие вопросы квантовой информации, в частности понятие кубита и элементарные операции над ними. Кубит (q-бит, от quantum bit – квантовый бит) – это минимальная единица передаваемой или хранимой квантовой информации, аналогичная биту в классической информации.

Физически кубит определяет волновую функцию двухуровневой системы. Напомним, под двухуровневой понимается квантовая система, которая может находиться в одном из двух возможных состояний. Типичным примером двухуровневой системы является атом, который может находиться только на двух энергетических уровнях – основном E_g и возбужденном E_e (считается, что остальные уровни энергии атома находятся слишком далеко, и вероятность перехода на них пренебрежимо мала). Также, для реализации кубита можно использовать возможные состояния спина электрона и поляризацию фотона.

Преобразования над кубитами осуществляются путём воздействия на соответствующие степени свободы физического объекта. Например, поляризационные кубиты преобразуются при помощи фазовых пластинок, состояние электрона в двухуровневом атоме задается приложением импульса резонансного электромагнитного поля определенной длительности и амплитуды, и.т.д.

Математически, кубиту соответствует единичный вектор в двумерном пространстве, заданном набором двух базисных векторов $|0\rangle$ и $|1\rangle$, которые аналогичны значениям нуля и единицы классического бита. Таким образом, кубит отличается от классического бита тем, что может находиться в состоянии произвольной суперпозиции базисных векторов $|S\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, где α и β – комплексные числа, удовлетворяющие условию $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Если учесть, что общая фаза волновой функции несущественна, то состояние кубита задается двумя вещественными параметрами, например, сферическими координатами точки на сфере Блоха с единичным радиусом (θ, φ) .

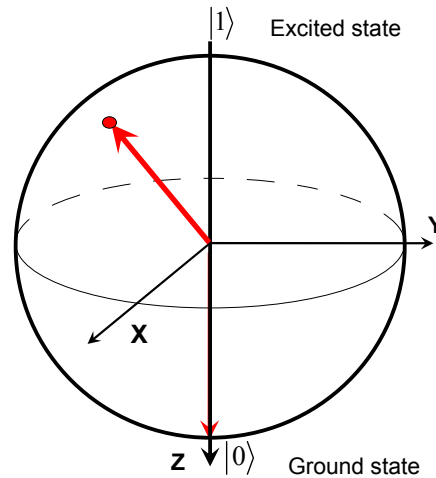


Рис. 6.2: Изображение состояния двухуровневой системы на сфере Блоха.

Далее, говоря о двух ортогональных состояниях единичного кубита, мы будем пользоваться обозначениями: $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. Если речь пойдет о состояниях конкретной системы, например, поляризации света, то будем пользоваться другими обозначениями, такими как $\{|H\rangle, |V\rangle\}$ – это будет ясно из

контекста. Еще раз подчеркнем, что нельзя сказать, что кубит представлен либо вектором $|0\rangle = (1, 0)$, либо вектором $|1\rangle = (0, 1)$ – это лишь две возможности из бесконечного многообразия состояний. Хотя состояние кубита описывается волновой функцией и строго определено, отдельные измерения дают вероятностные результаты. Вероятность обнаружить кубит в состояниях $|0\rangle$ и $|1\rangle$ равна $|\alpha|^2$ и $|\beta|^2$, соответственно.

С другой стороны, для кубита с заданной волновой функцией всегда можно перейти к базису, в котором он с достоверностью находится в одном из состояний. Например, рассмотрим состояние

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle). \quad (6.1)$$

При измерениях в базисе $|0\rangle$ и $|1\rangle$, очевидно, что состояния нуля и единицы будут обнаружены с вероятностью 50%. Однако если в качестве базисных использовать состояния $|+45\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle)$ и $|-45\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle)$, то состояние $|S\rangle$ уже строго определено и не флуктуирует при измерениях. Легко убедиться, что новые базисные состояния $|+45\rangle$ и $|-45\rangle$ ортогональны: $\langle +45 | -45 \rangle = 0$.

Утверждение об однозначности измерения значения кубита в новом базисе доказывается следующим образом. Применим к кубиту $|S\rangle$ преобразование вида:

$$\begin{aligned} \hat{H}|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle), \\ \hat{H}|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle). \end{aligned} \quad (6.2)$$

Тогда $\hat{H}|S\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle + |1\rangle + |0\rangle - |1\rangle) = |0\rangle$. Таким образом, получается, что измерение кубита в новом базисе всегда будет давать ноль. Преобразование \hat{H} называется **преобразованием Адамара**³.

Из сказанного следует интересный вывод. Измерив состояние одиночного кубита и обнаружив его, например, в состоянии $|0\rangle$, мы можем только заключить, что исходная волновая функция содержала некоторую часть $|0\rangle$, так что вероятность обнаружить ее в этом состоянии отличалась от нуля. Однако, если мы располагаем большим ансамблем кубитов, имеющих одинаковые волновые функции, эти волновые функции могут быть найдены в эксперименте (разумеется, с точностью до фазы). Для этого достаточно опытным путем подобрать такой базис, в котором система с достоверностью находится в состоянии $|0'\rangle$. В этом базисе кубит, очевидно, характеризуется волновой функцией $1|0'\rangle + 0|1'\rangle$. Процедура определения волновой функции носит название **квантовой томографии**. Известные практическая реализации квантовой томографии отличаются от описанной нами умозрительной

³В нашем курсе мы рассматриваем только состояния с точно известной волновой функцией – так называемые *чистые* состояния. Кроме них, известны так называемые *смешанные* состояния, волновая функция которых сама определена только вероятностным образом. Для таких состояний переход к новому базису не позволяет полностью избавиться от флуктуаций. Прямая аналогия рассмотренным преобразованиям – преобразование поляризации света в оптике. Если свет является полностью поляризованным (в общем случае этому соответствует некоторая эллиптическая поляризация), то всегда можно с помощью фазовой пластинки без потерь мощности привести это состояние к линейной поляризации (горизонтальной H или вертикальной V). Этого, однако, нельзя сделать с неполяризованным светом.

процедуры подбора базиса, но в любом случае основаны на сборе статистики для ансамбля квантовых систем, находящихся в одинаковом состоянии, либо многократных измерениях для системы, состояние которой перед каждым измерением приготавливается одинаковым образом.

Несколько кубитов могут образовывать т.н. перепутанные состояния⁴, для которых волновая функция не сводится к прямому произведению волновых функций отдельных кубитов. Вообще говорят, что квантовая система состоит из n кубитов, если пространство ее состояний имеет размерность 2^n , и при этом имеется 2^n взаимно ортогональных квантовых состояний. Заметим, что n классических битов могут представлять 2^n различных состояний. В общем случае 2^n взаимно ортогональных состояний n кубитов можно представить в виде вектора $\{|i\rangle\}$, где i - это n -разрядное двоичное число. Например, для трех кубитов $n = 3$: $\{|000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, |011\rangle, |100\rangle, |101\rangle, |110\rangle, |111\rangle\}$ - всего 2^3 состояний.

Важное значение в квантовой информации имеет базис так называемых **состояний Белла** для двух кубитов

$$\begin{cases} \left| \Psi_{12}^{(-)} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle_1 |1\rangle_2 - |1\rangle_1 |0\rangle_2] \\ \left| \Psi_{12}^{(+)} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle_1 |1\rangle_2 + |1\rangle_1 |0\rangle_2] \\ \left| \Phi_{12}^{(-)} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle_1 |0\rangle_2 - |1\rangle_1 |1\rangle_2] \\ \left| \Phi_{12}^{(+)} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle_1 |0\rangle_2 + |1\rangle_1 |1\rangle_2] \end{cases} \quad (6.3)$$

По этому ортонормированному базису можно разложить любое чистое состояние пары частиц. Все четыре состояния Белла являются перепутанными. Позже мы покажем, что для собственных состояний этого базиса нарушаются **неравенства Белла** – это, в частности, будет означать, что состояния базиса Белла заведомо не имеют классического аналога (что и является следствием их перепутанности).

6.3 Приготовление и преобразование состояний

Говоря об основных этапах эволюции кубитов, выделим три ее компоненты: приготовление, (унитарное) преобразование и измерение. Вопросы об измерении мы коснулись выше; еще раз мы обсудим эту проблему, когда будем говорить об интерпретации квантовой механики. Сейчас же мы перейдем к приготовлению и преобразованию состояний кубитов на примере двухуровневых атомов.

Современная лабораторная техника позволяет поместить одиночный атом в ловушку и охладить его до сверхнизких температур, при этом он переходит в основное состояние $|0\rangle$. Таким образом, исходное состояние нашего кубита известно. Преобразования этого состояния экспериментально

⁴Перепутывание - (“запутывание”, “сцепленность”, “переплетение” - различные переводы немецкого термина *verschrankung*) – это квантовая разновидность корреляции, не имеющей классического аналога. На словесном уровне, две подсистемы являются перепутанными, когда их совместное состояние более определено и менее стохастично, чем состояние каждой из подсистем. Простейшее (нестрогое) математическое определение состоит в том, что волновая функция перепутанного состояния не сводится к произведению волновых функций составляющих систему частей.

осуществляют, воздействуя на атом лазерными импульсами света, вызывающими резонансные переходы в возбужденное состояние. Пример такого воздействия – π -импульс резонансного поля, переводящий двухуровневую систему из состояния $|0\rangle$ в состояние $|1\rangle$. Напомним основные моменты этой теории.

Пусть в момент времени $t_0 = 0$ на атом действует короткий лазерный импульс с известными амплитудой и длительностью. Лазерное излучение с большой точностью можно рассматривать классически. Пусть для простоты частота лазера точно попадает в резонанс с частотой перехода $\omega_{10} = (E_1 - E_0) / \hbar$ между $|0\rangle$ и одним из возбужденных $|1\rangle$ состояний атома. Тогда атом под действием лазерного импульса длительностью T переходит в известное состояние $|\psi\rangle = \cos \Omega T |0\rangle + e^{-i\omega_0 T} \sin \Omega T |1\rangle$, частота Раби Ω определяется амплитудой поля в импульсе. Импульс длительностью $\frac{\pi}{\Omega}$ (π -импульс) полностью переводит систему из основного в возбужденное состояние. Варьирование длительности импульса дает возможность приготовить любое заданное состояние. Например, для перевода системы из основного состояния в когерентное $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ необходимо подействовать на нее т.н. $\pi/2$ -импульсом, при котором $T = \frac{\pi}{2\Omega} \Rightarrow t_{\pi/2}$ (см. задачу 2 в конце главы).

Таким образом, атом в момент окончания лазерного импульса готовится в любом наперед заданном состоянии. Можно рассмотреть, как это состояние преобразуется, если по прошествии определенного времени подействовать на него еще одним или несколькими лазерными импульсами. Задача вполне аналогична только что рассмотренной, за тем исключением, что в момент начала действия импульса атом находится в произвольном (а не в основном) состоянии. Ее анализ показывает, что результат такого воздействия на состояние $a_0|0\rangle + a_1|1\rangle$ всегда сводится к домножению вектора (a_0, a_1) на некоторую матрицу P . Необходимость сохранения нормы $|a_0|^2 + |a_1|^2$ означает, что эта матрица должна быть унитарной; в остальном, варьируя длительность и фазу действующего на атом импульса, матрицу P можно менять произвольным образом.

В квантовой информации устройства, обеспечивающие преобразования кубитов, называют логическими элементами (введены Давидом Дойчем в 1985-1989 гг.)⁵. Математически они описываются соответствующими операторами.

Например, рассмотрим преобразование кубита, соответствующее свободной эволюции атома в отсутствие оптического поля \hat{P} : $|0\rangle \xrightarrow{P} |0\rangle$, $|1\rangle \xrightarrow{P} \exp(i\omega t) |1\rangle = \exp(i\theta) |1\rangle$ (фазовращатель). Тогда состояние кубита (по прошествии времени t) изменится в результате воздействия операции $P(\theta)$:

$$\hat{P}(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix}. \quad (6.4)$$

В другом виде его можно записать так: $\hat{P}(\theta) = |0\rangle\langle 0| + \exp(i\theta) |1\rangle\langle 1|$.

Перечислим некоторые основные квантовые логические элементы:

1. $\hat{I} \equiv |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ - тождественное преобразование

⁵Разумеется, схемы логических элементов известны и для других реализаций кубитов, таких как спины или фотоны.

$$2. \hat{X} \equiv |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \text{логический элемент "НЕ"}$$

$$3. \hat{Z} \equiv \hat{P}(\pi) \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$4. \hat{Y} \equiv \hat{X}\hat{Z} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$5. \hat{H} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [(|0\rangle + |1\rangle)\langle 0| + (|0\rangle - |1\rangle)\langle 1|] \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} - \text{логический элемент Адамара}$$

мент Адамара

Все они – т.н. одно-кубитовые операции, которые действуют на единственный кубит. Напомним, что для классических битов существует только две логические операции: операции “тождественного преобразования” и отрицания “НЕ”. В квантовом случае, при операции “НЕ” состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ меняются местами, т.е. существует прямая аналогия с классикой. Поскольку такая операция представляется оператором Паули $\hat{\sigma}_x$, то она часто обозначается символом \hat{X} . То же относится и к обозначениям \hat{Z} и \hat{Y} .

Отметим, что описанные процедуры приготовления состояния не являются измерением чего-либо, так что эти процедуры не эквивалентны, как это часто полагают. Существенным допущением явилось классическое описание лазерного поля, которое играет роль заданной внешней силы, действующей на атом. Как и при описании измерения, на стадии приготовления необходимо "рукой" установить разумную границу между классическим и квантовым мирами.

В частности, предположение о классическом характере поля означает пренебрежение спонтанными переходами между уровнями атома, что допустимо в случае достаточно короткого лазерного импульса. Учет спонтанного излучения привел бы релаксации квантовой системы. В результате достаточно долгой релаксации атом с большой вероятностью снова оказывается в основном состоянии.

6.4 Криптография. Квантовое распределение ключа

Квантовые вычисления, основанные на описанном выше аппарате, пока остаются на уровне лабораторных опытов. Однако, одно из приложений квантовой информации уже нашло применение в практике. Речь идет о квантовой криптографии. Квантовую криптографию можно определить как междисциплинарную область знания, технологии и техники, в которой решается задача об обеспечении легитимных пользователей идентичными случайными последовательностями символов посредством передачи квантовых состояний. Давайте выясним, что это определение означает и почему упомянутая задача важна для практики.

К.Шеннон рассматривал шифрование (кодирование) как отображение исходного сообщения в криптограмму - зашифрованное сообщение:

$$C = F_i(M),$$

где C – криптограмма (от coding), F_i – отображение, M – исходное сообщение (от message), i - индекс, соответствующий конкретному используемому

ключу.

Рассмотрим простейший шифр, в котором исходный алфавит сообщения совпадает с множеством знаков ключа и множеством знаков криптограммы. (Этот способ шифрования был изобретен Жильбером Вернамом.) Пусть кодирование выполняется путем замены знаков исходного сообщения на знаки криптограммы в зависимости от очередного значения символа ключа, который выбирается из случайной последовательности чисел от 0 до 39. Тогда сообщение, ключ и криптограмма представляются в виде последовательности знаков одного и того же алфавита. Например, будем использовать простой алфавит заглавных букв русского языка, пробела и нескольких знаков препинания:

А	Б	В	...	Э	Ю	Я		.	,	!	?	;
00	01	02		31	32	33	34	35	36	37	38	39

Таблица 1. Соответствие символов алфавита числам от 00 до 39

Допустим, мы хотим зашифровать сообщение «КОД ВЕРНАМА». Запишем его в верхней строке вспомогательной таблицы. Ниже укажем соответствующие численные символы из верхней таблицы. В третью строку поместим случайную выборку из сорока чисел от 00 до 39. В последней строке поместим результат суммирования символов второй и третьей строки по модулю 40:

К	О	Д		В	Е	Р	Н	А	М	А
10	14	04	34	02	05	16	13	00	12	00
15	04	13	28	11	09	38	30	02	24	05
25	18	17	22	13	14	14	03	02	36	05

Таблица 2. Пример кодирования сообщения «КОД ВЕРНАМА» (первая строка), представленного набором чисел (вторая строка), последовательность случайных чисел (третья строка), и результат его кодирования (четвертая строка).

Например, четвертый символ «пробел» в сообщении имеет числовой код «34». Соответствующее случайное число, выпавшее на этот символ, оказалось «28». Тогда $34 + 28 = 62 = 40 + 22$, следовательно, остаток при суммировании по модулю «40» равен 22. Таким образом, шифрование и дешифрование по рассмотренному алгоритму можно записать в виде:

$$M + k \pmod{40} = C.$$

$$C - k \pmod{40} = M.$$

Клод Шеннон показал, что аналогичный метод с ключем, имеющим такую же длину, как и само сообщение, обеспечивает абсолютно защищенную передачу, при условии что ключ является действительно случайным и используется не более одного раза. Примечательно, что результат не зависит от вычислительной мощности, доступной криптоаналитику. Шифры такого рода называются безусловно стойкими. Криптосистемы, использующим равновероятный случайный ключ, имеющий длину, равную длине сообщения, называются одноразовыми блокнотами. Несмотря на обеспечение безусловной секретности, на практике такие системы получили ограниченное применение, поскольку требуют передачи ключа большого объема для

каждого нового сообщения. А для длинных ключей процедура их управления, включающая их генерацию, передачу и хранение, крайне усложняется. Другим недостатком кода Вернама является тот факт, что ключ должен использоваться лишь один раз. При повторном использовании злоумышленник может, записывая и сравнивая отдельные части криптограммы, восстановить как фрагменты открытого текста, так и сам ключ.

Кроме того, в рамках классических физических представлений невозможно обеспечить секретное распределение ключа через открытый канал связи, т.к. нельзя гарантировать обнаружение попыток подслушивания при передаче ключа. Поэтому криптограммы с одноразовыми ключами не получили широкого применения.

На сегодняшний день, известно два решения проблемы распределения ключа. Первый - математический - достигается с помощью так называемых двухключевых протоколов или криптографии с открытым ключом. Он используется, например, для шифрования информации при ее передаче в Интернет. Второй способ - физический - реализуется с помощью квантовой криптографии. Поэтому иногда квантовую криптографию называют квантовым распределением ключей (Quantum Key Distribution). Квантовая криптография фактически основана на соотношении неопределенностей Гейзенберга: наблюдаемые величины, которым в квантовой механике ставятся в соответствие некоммутирующие операторы, не имеют общего набора собственных векторов, и не могут быть одновременно измерены. Таким образом, в основе квантовой криптографии лежат законы природы, а не вычислительные или любые другие возможности легитимных пользователей или злоумышленников.

По сложившейся традиции, особенно в англоязычной литературе, участники процесса кодирования/декодирования называют Алисой и Бобом. Кроме того, в криптографии рассматривается некий злоумышленник или подслушиватель (eavesdropper) Ева, который владеет современными вычислительными ресурсами, полностью осведомлен об используемых криптографических методах, алгоритмах, протоколах, и т.д. и пытается каким-либо образом скомпрометировать их. Под компрометацией понимается несанкционированное чтение закрытой информации, ее модификация и т.д. Все эти действия подслушателя Евы называются криптографической атакой.

Идея квантовой криптографии состоит в том, чтобы организовать передачу данных таким образом, чтобы при криптографической атаке Ева неизбежно вносила в передаваемый сигнал изменения. Под словом “неизбежно” понимается “вследствие соотношения неопределенностей” – например, измерение импульса квантовой частицы неизбежно приводит к появлению неопределенности координаты. Появление искажений передаваемых



Рис. 6.3: Схема общения между участниками протоколов квантовой криптографии.

данных можно зафиксировать и прекратить передачу до обнаружения и устранения подслушивающей аппаратуры.

Основополагающей является *теорема о запрете клонирования*: неизвестное квантовое состояние нельзя скопировать, сохранив исходное состояние неизменным. Унитарность эволюции квантово-механических систем делает такой процесс возможным только при искажении копируемого состояния⁶. Более того, чем больше информации о состоянии извлекается в процессе копирования, тем большее искажение вносится в исходное состояние. Эта теорема лежит в основе квантовой криптографии. Действительно, искажение состояния приводит к статистическим ошибкам, проявляющимися на определенном этапе выполнения протокола квантовой криптографии. Анализ этих ошибок позволяет легитимным пользователям сделать вывод о несанкционированном вторжении в линию связи и либо исправить их, либо прервать сеанс связи.

Кодирование информации в квантовых состояниях впервые было предложено в работах Стефана Визнера, а также Чарльза Беннета и Жюль Брассарда. Их идея состояла в том, что пассивный подслушиватель не может достоверно различить неортогональные квантовые состояния (назовем их $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$), если он не знает базиса, в котором те были приготовлены. На этом этапе проявляется принципиальное отличие между классическими и квантовыми состояниями. Действительно, предположим, что Ева настраивает свой измеряющий прибор в некоем исходном состоянии $|m\rangle$. Ее цель – различить состояния $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$, не возмущая их. Ее действия будут описываться следующими унитарными преобразованиями над входными состояниями:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle|m\rangle &\xrightarrow{U} |\psi\rangle|m_1\rangle, \\ |\varphi\rangle|m\rangle &\xrightarrow{U} |\varphi\rangle|m_2\rangle. \end{aligned}$$

Унитарность сохраняет скалярное произведение, поэтому

$$\langle\psi|\varphi\rangle U^\dagger U \langle m|m\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle \langle m_1|m_2\rangle,$$

откуда следует, что

$$\langle m_1|m_2\rangle = 1.$$

Это соотношение означает, что конечное состояние измерительного прибора Евы одно и то же. Ева не возмутила квантовых состояний, но она и не получила никакой информации о них. Можно рассмотреть и более общее измерение, когда Ева возмущает своим прибором исходные состояния:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle, |\varphi\rangle \rightarrow |\varphi'\rangle$$

Тогда в результате ее действий:

$$|\psi\rangle|m\rangle \rightarrow |\psi'\rangle|m_1\rangle,$$

$$|\varphi\rangle|m\rangle \rightarrow |\varphi'\rangle|m_2\rangle.$$

И опять, в силу унитарности, получаем:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\psi'|\varphi'\rangle \langle m_1|m_2\rangle.$$

Наилучшая ситуация с точки зрения Евы возникает, когда скалярное произведение $\langle m_1|m_2\rangle$ принимает минимальное значение. Это происходит при условии

$$\langle\psi'|\varphi'\rangle = 1,$$

(так как $\langle\psi|\varphi\rangle = \text{const} \neq 0$). При этом она получает максимальную

⁶Процедура копирования с разрушением исходного состояния называется *квантовой телепортацией*.

возможность различить два состояния своего прибора, но два исходно неортогональных состояния становятся неразличимыми.

Итак, квантовая криптография позволяет решить одну из проблем классической криптографии, а именно - распределение ключей с последующим шифрованием в режиме одноразового блокнота. Тем самым, обеспечивается безусловная секретность при обмене информацией между легитимными пользователями. При этом, как уже говорилось, для обеспечения безусловной секретности необходимо удовлетворить трем условиям:

- сообщение шифруется ключом, который представляет собой случайную последовательность символов, например, нулей и единиц;
- длина ключа должна быть не меньше длины сообщения;
- ключ используется только один раз.

Кроме квантового канала связи, по которому передающая и принимающая стороны обмениваются квантовыми состояниями – либо по волоконной оптической линии связи, либо через атмосферу, важно, что неотъемлемым атрибутом КК является т.н. «открытый» канал связи. Канал называется открытым, если передаваемая по нему информация может быть доступна любому участнику протокола, в том числе злоумышленнику. Важным условием использования открытого канала в КК является невозможность изменить передаваемую по нему информацию. Таким каналом может выступать, например, интернет.

6.5 Протокол BB84

Под протоколом в криптографии понимается совокупность действий (таких как инструкции, команды, вычисления, алгоритмы), выполняемых в заданной последовательности двумя или более легитимными субъектами с целью достижения некоего результата.

Известно несколько протоколов распределения ключей на основе дискретных квантовых состояний. Наиболее известный из них - BB84. В нем используется два (или, в общем случае, три) взаимно-несмещенных базиса, состоящих из пары ортогональных состояний. Они образованы парами ортогональных поляризационных векторов: в лабораторном базисе: ($|\uparrow\rangle \equiv |V\rangle, |\leftrightarrow\rangle \equiv |H\rangle$), в диагональном базисе: ($|\nearrow\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\{|H\rangle + |V\rangle\}, |\searrow\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\{|H\rangle - |V\rangle\}$). Протокол включает следующие этапы, которые проиллюстрированы в таблице 3:

1. Вводится синхронизация между действиями Алисы и Боба, т.е. каждый из них знает наверняка, в какой момент времени посылается состояние;
2. Алиса выбирает случайный массив битов (чередование 0 или 1 в моменты, оговоренные синхронизационным протоколом);
3. Алиса выбирает случайную последовательность (поляризационных) базисов – чередование либо лабораторного, либо диагонального;
4. Алиса посылает Бобу последовательность фотонов, кодируя поляризацию каждого фотона, исходя из массива битов и поляризационного

базиса: каждый фотон имеет определенную поляризацию и описывается одним из четырех базисных векторов. Например, единице соответствуют состояния $|\uparrow\rangle$, $|\searrow\rangle$, а нулю – состояния $|\leftrightarrow\rangle$ и $|\swarrow\rangle$ в лабораторном и диагональном базисах, соответственно.

5. Боб принимает (измеряет) посланные Алисой фотоны в одном из двух базисов. Причем выбор базиса – случаен. Боб интерпретирует результаты своих измерений в бинарном представлении, т.е. пользуясь тем же правилом, что и Алиса: «0» - $|\leftrightarrow\rangle$, $|\swarrow\rangle$ и «1» - $|\uparrow\rangle$, $|\searrow\rangle$. Заметим, что, как следует из теории измерений, Боб полностью теряет информацию о состоянии фотона, поляризованного в лабораторном базисе, измеряя его в диагональном базисе и, наоборот. Следовательно, Боб получает достоверную информацию о состоянии фотонов только в половине всех случаев – когда выбранный им базис совпал с базисом Алисы, т.е. когда измерение дает детерминированный результат. Если подслушивания не было, то в оставшейся половине случаев Алиса и Боб имеют некоррелированные результаты. Следовательно, в среднем, Боб получает массив битов с 25%-ым содержанием ошибок. Этот массив называется сырым ключом. Кроме того, следует учитывать, что часть фотонов теряется при передаче. Практически, уровень технических ошибок в квантовых протоколах на сегодняшний день составляет несколько процентов (в отличие от уровня 10^{-9} , достижимого в современных оптоволоконных линиях связи). Этот уровень называется Quantum Bit Error Rate (QBER).
6. Происходит обсуждение результатов измерений по открытому каналу связи, причем и Алиса, и Боб предполагают, что их могут подслушать, но не перехватить или изменить результаты. Сначала они определяют, какие из фотонов были зарегистрированы Бобом. Затем, определяют, в каких случаях Боб угадал базис: Боб сообщает базис, в котором производилось измерение, но не сообщает сам результат. Оставляются только те события, для которых базисы Алисы и Боба совпали. При этом теряется 50% информации – когда Боб неверно угадал базис. Алиса и Боб считают, что в случаях, когда Боб угадал базис, биты, закодированные соответствующими фотонами, переданы правильно. Заметим, что по открытому каналу информация о самой случайной последовательности битов, посылаемых Алисой, не передается – вывод делается только на основе теории квантовых измерений. Каждый из переданных таким образом фотонов в правильном базисе несет один бит информации. В итоге у Боба остается более короткий массив битов, который называется просеянным ключом.
7. Затем Алиса и Боб проверяют, были ли попытки подслушивания во время распределения ключа. Для этого они сравнивают некоторые биты, которые, как они считают, были распределены правильно, по открытому каналу связи. Позиции битов по шкале синхронизационного протокола должны выбираться случайно, но одинаково, скажем, сравнивая каждый третий бит. Если осуществлялось подслушивание, то с вероятностью 50% биты Алисы и Боба, которые должны были совпадать, различаются. Используемые для сравнения биты выбираются из исходной последовательности, и она сокращается. Если

сравнение не обнаруживает разницы, то Алиса и Боб делают вывод, что распределение ключа произошло с высокой степенью надежности (существует некоторая вероятность не обнаружить подслушивания, но при этом у подслушателя окажется мало информации).

8. Последний шаг протокола квантовой криптографии состоит в том, чтобы, используя классические алгоритмы, исправить ошибки (error correction) и уменьшить информацию, доступную Еве. Последняя процедура называется усилением секретности (privacy amplification). Простейшая процедура коррекции ошибок состоит в следующем. Алиса случайно выбирает пары битов и производит над ними логическую операцию XOR. Боб выполняет такую же операцию над соответствующими своими битами. Если результат совпадает, они сохраняют первый из двух битов и уничтожают второй – поскольку сама процедура происходит по открытому каналу и результат доступен Еве. Если результаты отличаются – оба бита выкидываются (на практике используется более сложный алгоритм). После этой процедуры Алиса и Боб имеют одинаковые копии ключа, но у Евы все же может остаться некоторая информация о нем, поэтому вступают в силу протоколы усиления секретности. Эти классические протоколы работают следующим образом. Алиса опять выбирает случайно пары битов и вычисляет их сумму по модулю 2 (XOR). Но в отличие от процедуры коррекции ошибок, она не сообщает это значение. Она лишь оглашает, какие биты были выбраны, например, под номерами 103 и 539. Затем Алиса и Боб заменяют два бита на результат операции XOR. Таким образом, Алиса и Боб укорачивают свои ключи. Если Еве доступна лишь часть информации о двух битах, то ее информация о результате выполнения операции XOR будет еще меньше. Итак, если вероятность ошибок не превосходит некоторой критической величины (в нерелятивистских схемах предел, по-видимому, составляет 11%, что определяется потерями в оптическом волокне), то далее возможна коррекция ошибок в нераскрытой части при помощи классических кодов и дальнейшее сжатие ключа для получения результирующего секретного ключа.
9. Включается абсолютно стойкий протокол одноразового блокнота через открытый канал связи.
10. Весь протокол повторяется каждый раз при необходимости послышки очередного сообщения.

ПЕРЕДАЧА КВАНТО- ВЫХ ДАН- НЫХ																			
АЛИСА																			
Случайная последовательность битов у Алисы	0	1	1	0	1	1	0	0	1	0	1	1	0	0	1	1	0	1	0
Базис, случайно выбираемый Алисой	D	R	D	R	R	R	R	R	D	D	R	D	D	D	R	D	R	R	D
Состояние, которое посылает Алиса	↗	↑	↘	↔	↑	↑	↔	↔	↘	↗	↑	↘	↗	↗	↑	↘	↔	↑	↗
БОБ																			
Базис, случайно выбираемый Бобом	R	D	D	R	R	D	D	R	D	R	D	D	D	D	R	R	R	D	D
Биты, регистрируемые Бобом (<i>сырой ключ</i>)	1	0	1	0	1	1	0	0	1	1	1	1	0	0	1	0	0	0	0
Учет технических потерь	1	×	1	×	1	1	0	0	×	1	1	1	×	0	1	×	0	0	0
ОТКРЫТОЕ ОБСУЖДЕНИЕ																			
Боб сообщает базис, в котором зарегистрирован бит	R		D		R	D	D	R	×	R	D	D	×	D	R	×	R	D	D
Алиса сообщает, какой базис совпадает с ее базисом	-		Да		Да	-	-	Да	-	-	-	Да	Да	Да	Да		Да	-	Д
Предварительная распределенная информация - <i>просеянный ключ</i>			1		1			0					1		0	1		0	0
КОРРЕКЦИЯ ОШИБОК																			
Боб сообщает случайно выбранные биты					1										1		0		
Алиса сравнивает их с соответствующими своими					Да										Да		Да		
ИТОГ																			
Распределенный ключ			1					0					1		0				0

Заметим, что на практике для передачи квантовых битов и обмена классическими сообщениями можно использовать один и тот же канал связи.

Вкратце рассмотрим, что происходит при попытке подслушителя (Евы) извлечь часть информации. Рассмотрим простейшую атаку «перехват-пересылка» в протоколе BB84. Эта атака сводится к тому, что Ева случайно выбирает один из двух измерительных базисов, производит измерение и перепосылает Бобу то состояние, которое она измерила. В половине случаев она правильно угадывает базис, производит адекватное измерение, и перепосылает соответствующее «правильное» состояние Бобу. В этом случае подслушитель остается незамеченным и извлекает всю информацию о состоянии. Однако в другой половине случаев Ева неправильно выбирает базис и, следовательно, посылает «неправильное» состояние, которое, будучи измерено в «правильном» базисе, даст ошибку с вероятностью $0.5 * 0.5 = 0.25$. Эта ошибка выявляется после процедуры сравнения базисов. Как видно, она более чем в два раза превышает критический уровень этого протокола 0.11.

К проблемам квантовой криптографии следует отнести наличие потерь в оптических элементах, флуктуации их параметров под внешним воздействием, присутствие темновых отсчетов в используемых однофотонных детекторах и др. Технический способ решения этих проблем состоит в использовании элементов криптографической системы более высокого качества. Физический путь состоит в разработке новых протоколов, обладающих более высоким уровнем критической ошибки.

6.6 Парадокс ЭПР. Копенгагенская интерпретация квантовой механики

В 1927 году Альберт Эйнштейн выступил против вероятностной трактовки математической модели квантовой механики, принадлежащей Нильсу Борну и Макс Борну. Хорошо известна его фраза «Бог не играет в кости». В 1935 году Эйнштейн вместе с Подольским и Розеном написал статью, в которой более подробно аргументировал неполноту квантовой механики. Сформулированный в статье парадокс носит название парадокса ЭПР. В последовавшей за этим двадцатилетней дискуссии Эйнштейна и Бора выработалась общепринятая сегодня копенгагенская⁷ интерпретация квантовой механики.

Необходимость какой-либо интерпретации квантовой механики вытекает из того, что сам по себе аппарат квантовой механики описывает только эволюцию квантовой системы, но не взаимодействие квантовой системы с классическим наблюдателем в процессе измерения. Любое измерение предполагает взаимодействие между квантовым объектом и классической измерительной системой (попытка квантовомеханического описания части измерительной системы всего-навсего сместит границу между квантовыми и классическими объектами). В 1932 году фон Нейман сформулировал постулат редукции, который адекватно описывает изменение состояния квантовой системы в момент измерения: если в результате измерения наблюдаемой A получено некоторое $S_3 \lambda$ эрмитова оператора \hat{A} , то волновая функция системы мгновенно редуцируется к соответствующей СФ $|\varphi_\lambda\rangle$ оператора \hat{A} .

⁷В Копенгагене жил и работал Нильс Бор.

Другими словами, происходит проектирование волновой функции системы на СФ $|\varphi_\lambda\rangle$: $|\psi\rangle \rightarrow \hat{P}_\lambda|\psi\rangle = \langle\varphi_\lambda|\psi\rangle |\varphi_\lambda\rangle$. С тех пор постулат редукции фон Неймана стал одним из важных элементов копенгагенской интерпретации.

Кроме того, интерпретация некоей теории должна определять, на какие вообще вопросы данная теория позволяет отвечать. Согласно копенгагенской интерпретации, квантовая механика отвечает на вопросы типа 'что будет, если...'. Например, что будет, если мы приготовим некую квантовую систему заданным образом, подействуем на нее неким внешним полем и измерим некую наблюдаемую. А вот на вопросы 'как устроено на самом деле' - например, 'что такое фотон' и 'чему равна какая-то величина до того, как ее измерили' - квантовая механика не отвечает, и лучше такие вопросы вообще не задавать.

В своей первоначальной трактовке парадокс ЭПР выглядел следующим образом: рассмотрим процесс, в котором некая частица распадается на две других. По закону о сохранении импульсов их импульсы жестко связаны. Измеряя импульс одной частицы, мы тем самым узнаем импульс другой частицы. Теперь измерив координату второй частицы, мы тем самым измерим одновременно и ее координату, и импульс, тогда как в рамках квантовой механики одновременное измерение некоммутирующих величин невозможно.

С точки зрения копенгагенской интерпретации парадокса нет – при измерении координаты второй частицы мы изменим ее состояние, и даже если ранее она находилась в состоянии с фиксированным импульсом – это состояние было нами безнадежно испорчено.

Проблема данной дискуссии заключается в том, что долгое время она лежала в области философских воззрений на теорию, никак не проявляющихся в эксперименте. В 1951 году Дэвидом Бомом был предложен вариант парадокса ЭПР, приближающий его к экспериментальной проверке. Вместо закона сохранения импульса было предложено использовать закон сохранения спина частиц, позволяющий создать систему двух коррелированных электронов с суммарным спином, равным нулю. Если обозначить состояние электрона со спином, направленным вверх, волновой функцией $|u\rangle$, а со спином, направленным вниз - $|d\rangle$, то волновая функция двух электронов будет иметь вид $|\psi\rangle = (|u, d\rangle - |d, u\rangle)/\sqrt{2}$. Особенность этой волновой функции в том, что ее нельзя записать как произведение волновых функций первого и второго электрона. Такие состояния называют «перепутанными».

В дальнейшем чаще рассматривался аналогичный эксперимент, в котором вместо электронов рассматривались одновременно испущенные фотоны с ортогональными поляризациями. Такие фотоны могут возникать в результате двухфотонного излучения или при спонтанном параметрическом рассеянии (в последнем случае пара коррелированных фотонов носит название бифотона). Волновая функция бифотона по-прежнему имеет вид $|\psi\rangle = (|V, H\rangle - |H, V\rangle)/\sqrt{2}$, где $|V\rangle$ - вертикально, а $|H\rangle$ - горизонтально поляризованный фотон, и не зависит от выбора базиса: если рассматривать поляризацию относительно оси, наклоненной на 45° , то волновая функция имеет вид $|\psi\rangle = (|+, -\rangle - |-, +\rangle)/\sqrt{2}$, где $|+\rangle$ - фотон с поляризацией под 45° , а $|-\rangle$ - ортогональный ему фотон с поляризацией под -45° .

Согласно постулату фон Неймана при измерении поляризации одного фотона происходит редукция волновой функции, и второй фотон оказывается в состоянии с фиксированной поляризацией. Однако к моменту измерения фотоны может разделять большое расстояние, и согласно постулатам

теории относительности второй фотон не мог мгновенно узнать о произошедшем с первым фотоном. С точки зрения Эйнштейна, это означает, что на самом деле состояние обоих фотонов было определено с самого начала, просто мы не знали, каким оно было. Другими словами, существует некий случайный скрытый параметр, заранее определяющий результаты измерения обоих фотонов. Таким образом, формулировка парадокса ЭПР в трактовке Боба предлагает в качестве альтернативы копенгагенской интерпретации теорию скрытых параметров, утверждающую, что невозможность получить полную информацию о состоянии частицы – недостаток наших знаний о системе, а не принципиальное свойство природы.

6.7 Неравенства Белла

Описанный эксперимент оставался умозрительным до 1964 года, когда Белл сформулировал неравенства, которые всегда выполняются в рамках теории скрытых параметров, но нарушаются в квантовой механике. Для вывода неравенства Белла рассмотрим эксперимент, в котором производится измерение поляризации двух коррелированных фотонов. Каждый из фотонов попадает на поляризационное зеркало (в качестве которого обычно используют поляризационные призмы), которое пропускает фотоны, поляризация которых направлена вдоль оси зеркала, и отражает ортогонально поляризованные фотоны. Фотон с поляризацией, составляющей угол α с осью зеркала, по закону Малюса проходит через него с вероятностью $\cos^2\alpha$ и отражается с вероятностью $\sin^2\alpha$. Детекторы (по два на каждое зеркало) регистрируют как прошедшие, так и отраженные фотоны. Пусть величина $A(\alpha)$ равна единице, если первый фотон прошел через зеркало, и минус единице, если отразился. Угол α определяет направление оси поляризационного зеркала. Аналогично, $B(\beta) = \pm 1$ определяет результат измерения второго фотона.

Очевидно, при измерении только одного фотона величины A и B с одинаковой вероятностью $P(1) = P(-1) = 1/2$ принимают одно из двух значений, однако результат их совместного измерения зависит от разности углов $\varphi = \alpha - \beta$. Поскольку фотоны имеют ортогональную поляризацию, то при $\varphi = \pi/2$ значения A и B полностью коррелируют, а при $\varphi = 0$ - антикоррелируют. Если сначала измеряется первый фотон, то с точки зрения квантовой механики в момент его измерения определяется поляризация второго фотона: если первый фотон прошел через зеркало, то поляризация второго фотона становится перпендикулярна оси α , а если первый отразился – то поляризация второго фотона параллель-

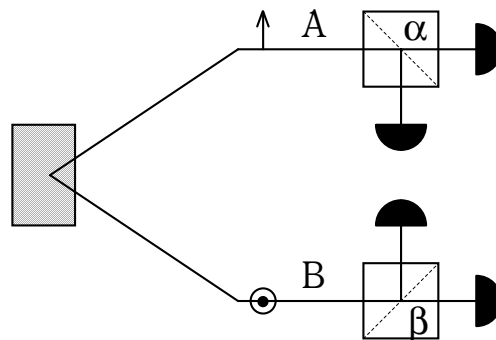


Рис. 6.4: Схема эксперимента по проверке неравенств Белла.

на этой оси. Далее вероятность прохождения или отражения второго фотона определяется по закону Малюса углом между поляризацией фотона $\alpha + \pi/2$ и углом β , определяющим ориентацию второго зеркала. Таким образом, среднее значение произведения величин A и B , называемое коэффициентом корреляции

$$E(\alpha, \beta) = \langle A(\alpha)B(\beta) \rangle = P_{++}(A, B) - P_{+-}(A, B) - P_{-+}(A, B) + P_{--}(A, B) = \\ = (\sin^2\varphi - \cos^2\varphi - \cos^2\varphi + \sin^2\varphi)/2 = -\cos 2\varphi$$

Для вывода неравенства Белла запишем наблюдаемую Белла - комбинацию произведений A и B для разных значений углов α и β :

$$S(\alpha, \alpha', \beta, \beta') = A(\alpha)B(\beta) - A(\alpha')B(\beta) + A(\alpha)B(\beta') + A(\alpha')B(\beta') = \\ = B(\beta)[A(\alpha) - A(\alpha')] + B(\beta')[A(\alpha) + A(\alpha')]$$

Поскольку величина $A = \pm 1$, то одна из двух квадратных скобок всегда равна нулю, а другая двойке. Отсюда следует, что наблюдаемая Белла $S(\alpha, \alpha', \beta, \beta') = \pm 2$, а ее среднее значение удовлетворяет неравенству $|\langle S(\alpha, \alpha', \beta, \beta') \rangle| \leq 2$. Это неравенство - следствие теории скрытых параметров, потому что оно выведено в предположении о существовании совместной функции распределения вероятностей четырех измеряемых величин $P\{A(\alpha), A(\alpha'), B(\beta), B(\beta')\}$.

С другой стороны, среднее значение наблюдаемой Белла имеет вид комбинации коэффициентов корреляции $\langle S(\alpha, \alpha', \beta, \beta') \rangle = E(\alpha, \beta) - E(\alpha', \beta) + E(\alpha, \beta') + E(\alpha', \beta')$, т.е. является функцией трех углов $\varphi = \alpha - \beta$, $\chi = \beta' - \alpha$ и $\theta = \alpha' - \beta'$ ($\alpha' - \beta = \theta + \chi + \varphi$):

$$\langle S(\alpha, \alpha', \beta, \beta') \rangle = \cos 2(\theta + \chi + \varphi) - \cos 2\varphi - \cos 2\chi - \cos 2\theta$$

Чтобы показать, что полученное выражение нарушает неравенство Белла, достаточно выбрать все три угла равными $2\varphi = 2\chi = 2\theta = \gamma$: $\langle S(\gamma) \rangle = \cos 3\gamma - 3\cos \gamma$. Экстремум функции достигается при $\sin 3\gamma = \sin \gamma$, максимумам и минимумам соответствуют значения $\gamma = \pi/4 + \pi n/2$, при которых $\langle S(\gamma) \rangle = \pm 2\sqrt{2}$.

Начиная с 1972 года нарушение неравенств Белла было неоднократно зарегистрировано в различных экспериментах. В справедливости квантовой механики и до этого не было особых сомнений, однако эксперименты по нарушению неравенств Белла показали, что любые попытки интерпретировать ее предсказания при помощи теории скрытых параметров заранее обречены. Для того чтобы в рамках классических

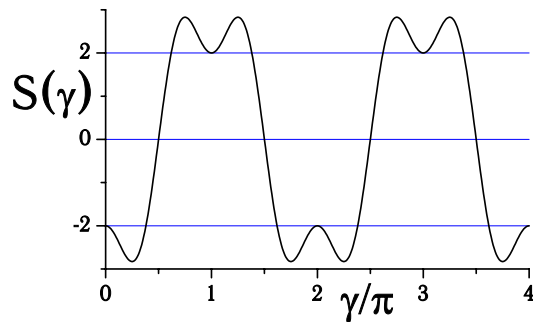


Рис. 6.5: Зависимость наблюдаемой Белла от углов, при условии их равенства: $2\varphi = 2\chi = 2\theta = \gamma$.

представлений объяснить нарушение неравенств Белла, необходимо ввести одно из двух предположений: допустить возможность распространения сигнала от первой частицы ко второй со скоростью большей скорости света либо допустить, что функция распределения вероятностей может принимать отрицательные значения. С первым из предположений связано то, что квантовую механику иногда называют «нелокальной» теорией.

Экспериментальную проверку нарушений неравенств Белла можно считать финалом дискуссии Эйнштейна и Бора, подтвердившим адекватность копенгагенской интерпретации квантовой механики. Тем не менее, дискуссии об интерпретациях квантовой механики на этом не прекратились. Существует альтернативная копенгагенской многомировая интерпретация квантовой механики, введенная Эвереттом и ДеВиттом. Ее преимуществом является возможность обойтись без постулата редукции – его место занимает предположение о множественности миров и о том, что в момент измерения мы производим выбор одного из них. Существуют также дальнейшие попытки объяснить нарушение неравенств Белла с классической точки зрения или обосновать несостоятельность экспериментов по их проверке. Однако следует понимать, что надежность предсказаний квантовой механики подтверждается многочисленными экспериментами и не зависит от того, как именно мы интерпретируем (т.е. объясняем словами) квантовомеханические формулы.

Дополнительный материал и задачи для семинарских занятий

6.А Квантовая телепортация

“... телепортация - это мгновенная транспортировка кого(чего)-либо в пространстве посредством передовых технологий”

Teleportation is “..apparently instantaneous transportation of persons etc., across space by advanced technological means”

The Oxford English Dictionary, 2nd edition (Clarendon Press, Oxford, 1989), vol. XVII, p.730)

Будем различать два термина: **копирование** неизвестного квантового состояния и **передача** квантового состояния. Первый процесс запрещен соответствующей теоремой. Во втором - квантовое состояние уничтожается в одной пространственно-временной точке и появляется в другой точке. Тривиальной реализацией его служит передача состояния по каналу связи. Изощренной реализацией является квантовая телепортация.

Под протоколом мы будем понимать последовательность манипуляций, приводящих к решению данной задачи. Итак, протокол квантовой телепортации содержит пять основных групп операций:

1. Приготовление начального состояния частицы “1”. Это состояние представляет собой суперпозицию двух базисных (булевых) состояний

$$|\Psi_1\rangle = \alpha|0_1\rangle + \beta|1_1\rangle$$

где комплексные амплитуды α и β связаны условием нормировки $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

2. Приготовление состояния Белла двух частиц “2” и “3”. Будем использовать синглетное состояние

$$\left| \Psi_{23}^{(-)} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |0_2\rangle |1_3\rangle - |1_2\rangle |0_3\rangle \}.$$
3. Измерение состояний Белла двух частиц “1” и “2”. Другими словами, совместное состояние двух частиц “1” и “2” проектируется в базис состояний Белла $\left| \Psi_{12}^{(-)} \right\rangle, \left| \Psi_{12}^{(+)} \right\rangle, \left| \Phi_{12}^{(-)} \right\rangle, \left| \Phi_{12}^{(+)} \right\rangle$.
4. Передача (сообщение) результата измерений (2 бита классической информации) по классическому каналу.
5. Выполнение четырех унитарных преобразований над частицей “3” в соответствии с полученным сообщением⁸.

Традиционно принято считать, что третья группа операций выполняется участником протокола с именем Алиса, а пятая - Бобом⁹.

Всю схему квантовой телепортации можно представить в виде двух станций - станции Алисы и станции Боба. Первая имеет два входа и один выход. На первый вход поступает частица “1” в произвольном состоянии, а на другой - половина перепутанной пары - частица “2”. Выход Алисы подключен к классическому каналу связи, по которому передается четыре возможных исхода измерения состояний Белла¹⁰, т.е. 2 бита классической информации. Станция Боба также имеет два входа и один выход. На первый вход поступает информация, переданная Алисой по классическому каналу, а на второй - другая половинка перепутанной пары - частица “3”. После выполнения Бобом трех унитарных преобразований частица “3” в скорректированном состоянии поступает на выход. При этом, как будет показано ниже, состояние частицы “3” на выходе станции Боба тождественно (является точной копией) неизвестного состояния частицы “1” - протокол КТ завершается.

Математически протокол КТ описывается предельно просто. Рассмотрим совместное состояние трех частиц до того, как две из них попали к Алисе:

$$\begin{aligned} \left| \Psi_{123} \right\rangle &= \left| \Psi_1 \right\rangle \otimes \left| \Psi_{23} \right\rangle = \\ &= \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \{ |0_1\rangle |0_2\rangle |1_3\rangle - |0_1\rangle |1_2\rangle |0_3\rangle \} + \frac{\beta}{\sqrt{2}} \{ |1_1\rangle |0_2\rangle |1_3\rangle - |1_1\rangle |1_2\rangle |0_3\rangle \}. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Прямые произведения состояний частиц «1» и «2» теперь выразим в терминах четырех состояний Белла $\left| \Psi_{12}^{(-)} \right\rangle, \left| \Psi_{12}^{(+)} \right\rangle, \left| \Phi_{12}^{(-)} \right\rangle, \left| \Phi_{12}^{(+)} \right\rangle$:

⁸Пятая группа операций - выполнение унитарных преобразований - считается тривиальной. В случае поляризационных состояний света, использованных в этих преобразованиях, состоят в повороте двух или одной полуволновых пластин на разные углы.

⁹Иногда присутствует и третий участник - с именем Виктор, сверяющий конечное и исходное состояния, и без имени - “ассистент”, помогающий Алисе приготовить ее состояние.

¹⁰Состояния Белла образуют полный ортонормированный базис для любых двухчастичных состояний.

$$\begin{aligned}
|\Psi_{123}\rangle = \frac{1}{2} [& |\Psi_{12}^{(-)}\rangle (-\alpha|0_3\rangle - \beta|1_3\rangle) + |\Psi_{12}^{(+)}\rangle (-\alpha|0_3\rangle + \beta|1_3\rangle) + \\
& + |\Phi_{12}^{(-)}\rangle (\beta|0_3\rangle + \alpha|1_3\rangle) + |\Phi_{12}^{(+)}\rangle (-\beta|0_3\rangle + \alpha|1_3\rangle)].
\end{aligned} \tag{6.6}$$

Видно, что общее состояние трех частиц представляется суммой четырех слагаемых, каждое из которых факторизовано в отношении состояния Белла частиц “1” и “2” и состояния третьей частицы. Вероятность измерения того или иного состояния Белла из (6.6) равна 1/4. Таким образом, после измерения Алисы частица “3”, находящаяся в станции Боба, окажется спроецированной на одно из четырех состояний, фигурирующих в (6.6). Каждое из этих четырех возможных состояний частицы “3” связано линейным преобразованием с состоянием исходной частицы “1”:

$$\begin{aligned}
-|\Psi_3^{(0)}\rangle &\equiv -\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = -I \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad -Z|\Psi_3^{(1)}\rangle = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \\
X|\Psi_3^{(2)}\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad -Y|\Psi_3^{(3)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{6.7}$$

Таким образом, получив информацию от Алисы, какое именно состояние Белла в данный момент она измерила (с вероятностью 1/4), Боб должен выполнить это преобразование, получив в итоге исходное. Причем, в одном из четырех случаев, как видно из (6.7), Бобу вообще не нужно ничего делать со своей частицей. Таким образом, становится понятно, что в результате КТ происходит расщепление информации о состоянии частицы “1”. Одна часть этой информации - результат измерения Алисы совместного состояния частиц “1” и “2” - передается по классическому каналу связи. Попросту говоря, это одно из четырех возможных закодированных сообщения, например, в цвете четырех ламп. Каждому состоянию Белла приписывается лампа определенного цвета, которая вспыхивает всякий раз, когда измеряется данное состояние. Боб, увидев вспышку определенного цвета (или получив эту информацию по телефону) выполняет соответствующее преобразование над своей частицей “3”, тем самым корректируя ее состояние. Подчеркнем, что эти преобразования являются унитарными, т.е. сохраняющими энергию - число частиц в протоколе КТ остается неизменным.

Другая часть информации - квантовая. Она заложена в полных корреляциях, существующих между частицами “2” и “3”, иными словами, в состоянии Белла, которое используется во второй группе операций протокола КТ (см. выше). Обратим внимание на некоторые особенности этого протокола.

1. Сформулированное выше требование о запрете клонирования неизвестного состояния выполняется. Исходное состояние, записанное на частице “1” уничтожается в результате измерения совместного состояния Белла частиц “1” и “2”.
2. Ни Алиса, ни Боб ничего не знают об исходном состоянии, поскольку владеют только частью полной информации - той, которая передается по классическому каналу.

3. На выходе станции Боба создается, в принципе, точная копия исходного состояния. Причем состояние это по-прежнему неизвестное.
4. Копирование происходит не мгновенно, а, по крайней мере, спустя время, которое нужно затратить на передачу классического сообщения от Алисы к Бобу.

Основная проблема при экспериментальной реализации квантовой телепортации с оптическими состояниями – выполнение измерений состояний Белла. Оказывается (и этот вывод строго доказывается в виде т.н. «no-go» теорем), что измерение состояний Белла нельзя выполнить, используя только линейные операции. А использование нелинейных процессов в оптике крайне неэффективно из-за малости соответствующих материальных характеристик (квадратичная восприимчивость)

На сегодняшний день протокол КТ неоднократно был продемонстрирован в эксперименте с оптическими состояниями и даже с массивными частицами. Необходимо заметить, что даже демонстрации представляют собой сложные эксперименты, выполняющиеся при использовании самой современной экспериментальной базы. В первой работе по оптической квантовой телепортации регистрируемый сигнал был так слаб (несколько отсчетов за 10 часов), что накопление полезного сигнала шло около месяца. Только на настройку схемы для проведения измерений требовалась неделя, в течение которой проводились всевозможные тесты, такие как проверка максимального перепутывания используемых ПС, выравнивание оптических путей с точностью до долей длины волны (десятки нанометров). В частности, схема упомянутого эксперимента включала несколько интерферометров Маха-Цандера, причем некоторые из них были вложены друг в друга, а максимальная длина плеча составляла несколько метров. Это интерференционное устройство крайне чувствительно к любым механическим, температурным и прочим флуктуациям длины плеч. Кроме того, все элементы протокола КТ выполнялись при помощи коротких лазерных импульсов, которые позволяли вносить синхронизацию в сам протокол, и которые приходилось совмещать на большой базе (при этом пространственная длительность импульса составляла несколько микрометров). Можно представить, насколько критичны оказывались любые внешние возмущения.

Литература по курсу

Основная

1. Дирак П.А.М. Принципы квантовой механики, М: Мир. 1972. 481 с.
2. Елютин П.В., Кривченков В.Д. Квантовая механика. М: Наука, 1976. 336 с.
3. Иродов И.Е. Квантовая физика. Основные законы. М: Бином, 2004. 256 с.
4. Нильсен М., Чанг И. Квантовые вычисления и квантовая информация. М.: Мир, 2006. 824 с.

Дополнительная

1. Баумейстер Д., Экерт А., Цайлингер А.. Физика квантовой информации. М.: "Постмаркет 2002". 376 с.
2. Бом Д. Квантовая теория. М: Наука, 1965.
3. Вихман Э. Берклевский курс физики, т.4. М: Наука, 1974. 396 с.
4. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. Введение в квантовую физику, М: Наука, 1988. 328 с.
5. Давыдов А. С. Квантовая механика. М: Наука, 1973. 703 с.
6. Де Бройль Л. Соотношения неопределенностей Гейзенберга и вероятностная интерпретация волновой механики М., Мир, 1986. 344 с.
7. Матвеев А.Н. Квантовая механика и строение атома. М: Высшая школа, 1965. 356 с.
8. Мигдал А.Б. Качественные методы в квантовой теории М.: Наука, 1975. 336 с.
9. Миронова Г.А. Конденсированное состояние вещества - от структурных единиц до живой материи, М: Физический факультет МГУ, 2004. 532 с.
10. Сивухин Д.В. Курс общей физики, т.5, ч.1. М: Наука, 1988. 416 с.
11. Фейнман Р. Фейнмановские лекции по физике, т.3, М: Мир, 1967. 238 с.
12. Фейнман Р. Фейнмановские лекции по физике, т.8, М: Мир, 1967. 272 с.
13. Фейнман Р. Фейнмановские лекции по физике, т.9, М: Мир 1967. 260 с.
14. Фок В.А. Начала квантовой механики. М: Наука, 1976. 376 с.
15. Шпольский Э.В. Атомная физика. М: Наука, 1984. 575 с.