

УЧИТЬСЯ СТАЛО ПРОЩЕ!



3-е издание

Квантовая физика

для
чайников



Разберитесь в основах
квантовой теории

Исследуйте сложные
концепции и явления

Узнайте о свойствах
элементарных частиц —
от фотона до бозона
Хиггса

Эндрю Циммерман Джонс

для
чайников



Квантовая физика

для
чайников

3-е издание

Эндрю Циммерман Джонс

УДК 530.145
ББК 22.314
Д42

Quantum Physics For Dummies®, 3rd Edition
by Andrew Zimmerman Jones

For Dummies® trademark is the exclusive property of Wiley and is used under license.

Original English language edition Copyright © 2024 by John Wiley & Sons, Inc. All rights reserved including the right of reproduction in whole in part in any form. This translation published by arrangement with John Wiley & Sons, Inc.

Квантовая физика для чайников, 3-е издание © 2024 by John Wiley & Sons, Inc. Все права, включая право на воспроизведение, защищены полностью или частично в любой форме. Этот перевод опубликован по соглашению с John Wiley & Sons, Inc.

Wiley, the Wiley Publishing Logo, For Dummies, Dummies Man and related trade dress are trademarks or registered trademarks of John Wiley and Sons, Inc. and/or its affiliates in the United States and/or other countries. Used by permission.

Wiley, логотип the Wiley Publishing, For Dummies, «Для чайников», Dummies Man и связанные с ними элементы являются зарегистрированными товарными знаками John Wiley and Sons, Inc. и/или ее филиалами в США и других странах.

Используется с разрешения.

Джонс, Эндрю Циммерман.

Д42 Квантовая физика для чайников / Эндрю Циммерман Джонс ; [перевод с английского Г. А. Вакулко]. — Москва : Эксмо, 2026. — 352 с. — (Для чайников).

ISBN 978-5-04-223168-1

В этой книге читатели познакомятся с основными концепциями квантовой физики, такими как квантование энергии, корпускулярно-волновой дуализм, уравнение Шредингера, принципы матричной и волновой механики, а также с важными феноменами — квантовым туннелированием и суперпозицией. Узнают о таких достижениях науки, как квантовая электродинамика, теория поля, о роли бозона Хиггса, о том, как открытия в области квантовой физики используются в промышленности — от производства лазеров и полупроводников до квантовых компьютеров и ядерной энергетики.

Особое внимание уделено выдающимся ученым — Планку, Эйнштейну, Борну, Фейнману, — чьи открытия заложили фундамент квантовой физики.

Книга представляет собой подробное и доступное введение в основы квантовой физики для старшеклассников и первокурсников, раскрывает ключевые этапы ее развития с начала XX века.

УДК 530.145
ББК 22.314

ISBN 978-5-04-223168-1

© Вакулко Г.А., перевод на русский язык, 2026
© Оформление. ООО «Издательство «Эксмо», 2026

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ	13
Об этой книге	13
Глупые предположения	15
Обозначения, принятые в книге	15
Помимо книги	16
Навигация	16
 1. НАЧАЛО РАБОТЫ С КВАНТОВОЙ ФИЗИКОЙ	17
 Глава 1. Что же такое квантовая физика?	19
Классика: предквантовая физика	20
Что делает физику квантовой?	20
Дело масштаба, или масштаб дел	21
Измерения и наблюдаемые величины:	
Почему ученые знают, что квантовая физика верна	22
Правильные эксперименты	23
Доверяй, но проверяй правильные тесты	23
 Глава 2. Стоя на плечах гигантов:	
Классическая физика	27
Объекты в движении: классическая механика	28
Ньютон устанавливает правила	28
Кинетическая энергия и импульс	30
Ловя волны	33
Некоторые свойства волнового фронта	33
Интерференция и суперпозиция волн	35
Да будет свет	37
Спор о природе света: корпускулы	
против колебаний	37
Противоречие в опыте Юнга с двумя щелями	39
Удивительные уравнения Максвелла	40
Эксперимент Майкельсона-Морли и загадочный	
отсутствующий эфир	44
Атомы: строительные кирпичи материи	46
Античный атомизм	47
Химики открывают атом (возможно)	47
И электрон	48
Термодинамика: еще одна горячая тема	50

Игры, в которые играют люди: Неизвестные и неопределенности	51
Бросок костей: Классическая вероятность	51
Неопределенности и отклонения	53
Глава 3. Квантовая революция	57
Дискретность: Проблема чернотельного излучения	58
Интуитивный (квантовый) скачок: спектр Макса Планка	60
Видя свет как частицы	62
Рассеяние света на электронах: Эффект Комптона	65
Атомная модель Бора	67
Изменение электронных орбит	68
Объяснение результатов с помощью модели Бора	69
Двойственная природа: Взгляд на частицы как на волны	69
Позитрон? Дирак и образование пар	71
Невозможно знать всё (Но можно выяснить?..)	72
Положение и импульс: принцип неопределенности Гейзенберга	72
Квантовые кости: новый взгляд на вероятность	75
Новый взгляд на свет: квантовая электродинамика	77
Что же колеблется?	77
Первые проблески КЭД	78
Фотон получает новую работу	80
Взламывая атомные части	83
Столкновение частиц для получения информации	84
Что удерживает атомное ядро	84
 2. ОСНОВЫ: ПРИНЦИПЫ И ТЕОРИИ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ	 87
Глава 4. Квантовая механика: Состояния частиц и дуализм	89
Квантование и квантовые числа	89
Вечно вращающийся электрон	90
Фермионы и бозоны	91
Переосмысляя корпускулярно-волновой дуализм	92
Происхождение корпускулярно-волнового дуализма	92
Значение корпускулярно-волнового дуализма	93
Понимая суть антиматерии	94
 Глава 5. Квантовая электродинамика и то, что за ней ...	95
Квантовая теория поля: Объяснение материи и энергии	95
Возвращаясь к квантовой электродинамике	96
Изучение ядерных сил и квантовой хромодинамики	97
Бозон Хиггса	98

Открывая возможности квантовой физики	100
Да будет свет из лазеров	100
Управление потоком с помощью полупроводников и транзисторов	101
Использование ядерной энергии	102
Переход на солнечную энергию	103
Глядя в будущее квантовых компьютеров	104
Вычисления с использованием суперпозиции состояний	104
Поддержание и развитие квантовых компьютеров	105

Глава 6. Квантовые коты и призрачное действие:

интерпретации квантовой физики	107
Вопрос о том, чему требуется интерпретация	108
Интерпретация вероятности и измерения	108
Интерпретация эффекта наблюдателя	108
Возвращаясь к запутанности	110
Открывая, что наиболее распространенная интерпретация – это пожать плечами	111
Обзор трех интерпретаций квантовой физики	111
Самая популярная: копенгагенская интерпретация	112
Занимательная интерпретация: многомировая интерпретация	113
Ответственный подход: Скрытые параметры	113
Непрекращающиеся дебаты и споры	114
Обсуждаем (мертвого?) кота в комнате	115
Эйнштейн и жуткое действие на расстоянии	116
Изучая запутанные эксперименты	118
Неравенство Белла	118
Великий эксперимент Алена Аспе	119

3. В ЧИСЛАХ: ОСНОВЫ МАТЕМАТИКИ

КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ	121
-------------------------------	------------

Глава 7. Погружение в матрицы:

Знакомство с векторами состояния	123
Создание своих собственных векторов в Гильбертовом пространстве	124
Упрощая жизнь с обозначениями Дирака	126
Сокращение векторов состояния в виде кет	127
Запись эрмитова сопряжения в виде бра	128
Умножение бра и кет: Вероятность, равная 1	128
Охватывая все базисы: бра и кет как безбазисные векторы состояния	129
Понимание некоторых соотношений с помощью кет-векторов	130

Знакомство с операторами	132
Здравствуйте, оператор: Как работают операторы	132
Я этого ожидал: Нахождение средних значений	133
Рассмотрим линейные операторы	135
Знакомство с эрмитовыми операторами и сопряжениями	136
Вперед и назад: Нахождение коммутаторов	137
Коммутирующие операторы	137
Нахождение антиэрмитовых операторов	138
Начиная с нуля и заканчивая Гейзенбергом	138
Собственные векторы и собственные значения:	
Что это такое	141
Понимание принципа работы	143
Нахождение собственных векторов и собственных значений	144
Нахождение собственных значений	144
Нахождение собственных векторов	145
Подготовка к обращению: упрощение с унитарными операторами	146
Сравнение матричного и непрерывного подходов	147
Переход к непрерывному случаю с помощью интегрального исчисления	148
Делая волну	148
Глава 8. Застревая в энергетических ямах	151
Глядя в прямоугольную яму	152
Ловим частицы в потенциальной яме	154
Связывание частиц в потенциальных ямах	155
Выход из потенциальных ям	155
Ловим частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ...	156
Определение энергетических уровней	159
Нормировка волновой функции	161
Добавление временной зависимости в волновые функции	162
Переход к симметричным прямоугольным потенциальным ямам	164
Ограниченный потенциал: взглянем на частицы и потенциальные ступеньки	165
Предположим, что частица обладает достаточной энергией	165
Случай, когда у частицы недостаточно энергии	170
Туннелирование через запрещенную область	174
Столкновение со стеной: частицы и потенциальные барьеры	174
Прохождение через потенциальные барьеры при $E > V_0$	175

Туннелирование через потенциальные барьеры при $E < V_0$	177
Несвязанные частицы: решение уравнения Шрёдингера для свободных частиц	179
Получение физической частицы с помощью волнового пакета	181
Разбираем пример с гауссовым пакетом	182

Глава 9. Туда-обратно с гармоническими осцилляторами	185
Разбираемся с гамильтонианом гармонического осциллятора	186
Классический подход к гармоническим колебаниям	186
Понимание полной энергии в квантовых колебаниях	187
Рождение и уничтожение: знакомство с операторами гармонического осциллятора	189
Следите за p и q : получение решения для энергетических состояний	190
Нахождение собственных состояний	192
Нахождение энергии состояния $a n\rangle$	192
Нахождение энергии $a^\dagger n\rangle$	193
Прямой вывод операторов a и $a^\dagger$	194
Нахождение собственных состояний энергии гармонического осциллятора	195
Немного возбуждения: поиск первого возбужденного состояния	198
Проверка реальности: подставляем числа	201

Глава 10. Работа с моментом импульса на квантовом уровне	205
Построение гамильтониана	206
Операторы в действии: кругом с угловым моментом	206
Нахождение коммутаторов L_x, L_y, L_z	208
Создание собственных состояний углового момента	209
Нахождение собственных значений углового момента	210
Вывод уравнений собственных состояний с $\beta_{\max}$ и $\beta_{\min}$	210
Определение вращательной энергии двухатомной молекулы	214
Нахождение собственных значений повышающего и понижающего операторов	215
Интерпретация углового момента через матрицы	216
Операторы повышения и понижения	218
Завершающий штрих: Переход к сферическим координатам	219
Закладываем (сферический) фундамент	220

Собственные функции L_z в сферических координатах ...	222
Собственные функции L^2 в сферических координатах ...	223
Назад к прямоугольным координатам	227
Глава 11. Головокружительное знакомство со спином ..	229
Исследование эксперимента Штерна-Герлаха и загадка исчезнувшего пятна	230
Погружаемся глубже в тему спина и собственных состояний	231
Знакомимся с половинами и целыми: поздоровайтесь с фермионами и бозонами	232
Операторы спина: Беготня вокруг углового момента	235
Определение операторов спина	235
Повышающие и понижающие операторы спина	236
Работа со спином $1/2$ и матрицами Паули	236
Матрицы спина $1/2$	237
Матрицы Паули	239
4. ПЕРЕХОД К ТРЕХМЕРНЫМ ВЫЧИСЛЕНИЯМ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ.....	241
Глава 12. Прямоугольные координаты: решение задач в трехмерном пространстве	243
Уравнение Шрёдингера в 3D	243
Преобразование уравнения Шрёдингера в прямоугольные координаты	244
Разделение уравнения Шрёдингера	245
Решение для свободной частицы в 3D	246
Нахождение уравнения полной энергии	248
Добавление временной зависимости	249
Поиск физического решения	249
Разбираемся с трехмерным прямоугольным потенциалом ...	251
Определение энергетических уровней	254
Нормировка волновой функции	254
Использование кубического потенциала	256
Пружиним в трехмерные гармонические осцилляторы	258
Потенциал трехмерной пружины	258
Решение уравнения Шрёдингера для трехмерной пружины	259
Энергия трехмерного осциллятора	260
Глава 13. Решение задач в сферических координатах	261
Выбор сферических координат	262
Рассматриваем центральные потенциалы в трех измерениях	263

Разбираем уравнение Шрёдингера	263
Угловая часть $\psi(r, \theta, \phi)$	265
Радиальная часть $\psi(r, \theta, \phi)$	265
Работа со свободными частицами в трехмерном пространстве	266
Сферические функции Бесселя и Неймана	268
Пределы для малых и больших ρ	269
Работа со сферически-симметричной прямоугольной потенциальной ямой	270
Заглядываем внутрь прямоугольной ямы: $0 < r < a$	271
За пределами прямоугольной потенциальной ямы: $r > a$	273
Изучаем особенности изотропного гармонического осциллятора	274
Глава 14. Простейший атом: Понимаем водород	277
Вспоминаем атомизм	278
Переходим к сути: уравнение Шрёдингера для атома водорода	279
Упрощение и разделение уравнения для атома водорода	281
Решение радиального уравнения Шрёдингера	284
Нахождение разрешенных энергий атома водорода	288
Построение формулы радиального решения	289
Обобщенный случай для водорода	291
Расчет энергетического вырождения	294
Квантовые состояния: добавляем спин	295
Охота за неуловимым электроном	297
Глава 15. Работа с множеством частиц и групповая динамика	299
Многочастичные системы	300
Рассмотрение волновых функций и гамильтонианов	301
Нобелевская возможность: рассматриваем многоэлектронные атомы	302
Рассмотрим мощнейший инструмент: симметрию перестановок	303
Плавающие автомобили: Решение систем многих различимых частиц	306
Жонглирование множеством идентичных частиц	307
Построение симметричных и антисимметричных волновых функций	310
Работа с идентичными невзаимодействующими частицами ...	311
Волновые функции двухчастичных систем	312
Волновые функции систем из трех и более частиц	313
Не всем вход разрешен: Принцип запрета Паули	313
Разбираемся в периодической таблице	314

Толкая систему: Теория возмущений	315
Введение в теорию возмущений	316
Работа с возмущениями невырожденных гамильтонианов	317
Работа с возмущениями вырожденных гамильтонианов	320
Когда частицы сталкиваются: теория рассеяния	321
Знакомство с рассеянием частиц и сечениями	322
Преобразование между системой центра масс и лабораторной системой	323
Отслеживание амплитуды рассеяния бесспиновых частиц	325
Борновское приближение: спасая волновое уравнение	326
5. СРЕДИ ДЕСЯТКОВ.....	329
Глава 16. Десять важнейших пионеров квантовой физики	331
Макс Планк (1858–1947)	331
Альберт Эйнштейн (1879–1955)	332
Нильс Бор (1885–1962)	332
Луи де Бройль (1892–1987)	333
Вернер Гейзенберг (1901–1976)	333
Эрвин Шрёдингер (1887–1961)	334
Поль Дирак (1902–1984)	334
Макс Борн (1882–1970)	335
Ричард Фейнман (1918–1988)	335
Мюррей Гелл-Манн (1929–2019)	336
Глава 17. Десять триумфов квантовой физики	337
Корпускулярно-волновой дуализм	337
Фотоэффект	337
Постулирование спина	338
Отличия между законами Ньютона и квантовой физики	338
Принцип неопределенности Гейзенберга	339
Квантовое туннелирование	339
Дискретный спектр атомов	340
Гармонический осциллятор	340
Прямоугольные ямы	341
Кот Шрёдингера	341
ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ	342
БЛАГОДАРНОСТИ	350

Введение

Физика как общая дисциплина не имеет границ — она охватывает физические явления от крайне больших (галактических масштабов) до очень маленьких (атомов и меньше). Эта книга посвящена именно очень маленькой стороне вещей — это специализация квантовой физики. Когда вы что-то квантуете, вы не можете уменьшать масштаб дальше — вы уже имеете дело с мельчайшими дискретными единицами материи.

Классическая физика прекрасно объясняет науку, стоящую за такими явлениями, как нагревание чашки кофе, ускорение при движении по наклонной плоскости или столкновение транспортных средств (как и миллион других вещей), но она сталкивается с проблемами, когда речь заходит о материи очень малых размеров. Квантовая физика обычно имеет дело с микромиром и исследует такие явления, как поведение отдельных электронов, движущихся вокруг ядра в атоме. И когда вы спускаетесь на этот крошечный уровень, происходящее может стать очень странным.

В квантовой физике содержатся принципы неопределенности, которые влияют на способность физиков точно определять физические характеристики частиц. Например, невозможно одновременно знать (с абсолютной точностью) точное положение частицы и ее импульс. Квантовая физика также объясняет, как работают энергетические уровни электронов, связанных в атоме. По мере того как физики все глубже искали способы моделирования реальности, квантовая физика позволила им больше узнать об этом микроскопическом мире материи и энергии. В этой книге вы познакомитесь со всеми этими темами и не только.

Об этой книге

Эта книга содержит необходимые для понимания концепты квантовой физики, включает историю ее открытия, объяснения (и мысленные эксперименты), описывающие ее основные проблемы и дискуссии, а также математический аппарат, необходимый для погружения в некоторые из ее центральных задач.

Квантовая физика — один из самых концептуально сложных для понимания предметов, известных науке. Это область, в которой даже самые выдающиеся эксперты могут вести горячие, принципиальные дебаты.

Первые несколько глав посвящены изучению предвосхищающей квантовую науку, тому, как были открыты идеи квантовой физики, и основным научным концепциям.

Но в конечном счете квантовая физика связана с решением уравнений, и эта книга не ускользает от этого. Начиная с главы 7, изложение предполагает довольно высокий уровень математической подготовки. Невозможно по-настоящему оценить предмет, не погрузившись в математический анализ, а также в такие области, как линейная алгебра и дифференциальные уравнения.

Читая книгу, вы обнаружите, что я использую следующие условные обозначения:

- » Курсивом выделяются технические термины, связанные с квантовой физикой, обычно при их первом появлении. За выделенным курсивом термином сразу следует его определение или объяснение. Когда этот термин встречается в последующих главах, он не обязательно выделяется курсивом.
- » Пронумерованные шаги при решении задач в этой книге помогают упорядочить процесс их решения.

Чтобы сделать материал более доступным, я разделил его на пять частей:

- » **Часть 1:** Начало изучения квантовой физики. В этой части вы познакомитесь с основными принципами квантовой физики, физическими концепциями, которые привели к их появлению, а также историей их открытия и развития.
- » **Часть 2:** Основы – принципы и теории квантовой физики. Эта часть поможет вам глубже погрузиться в концепции, лежащие в основе квантовой физики: от корпускулярно-волнового дуализма и различных типов физических частиц до возможных интерпретаций квантовой физики.
- » **Часть 3:** В числах – базовая математика квантовой физики. В этой части вы познакомитесь с математическим аппаратом, лежащим в основе открытий квантовой физики, включая обозначения, принятые физиками в этой области. Затем, опираясь на полученные знания, рассмотрите некоторые из наиболее простых задач, которые можно решить методами квантовой физики.
- » **Часть 4:** Трехмерные вычисления в квантовой физике. В этой части вы приступите к решению более сложных задач квантовой физики, включая использование прямо-

угольных и сферических координат. Вы также начнете изучать атом водорода и взаимодействие множества субатомных частиц.

- » **Часть 5:** Среди десятков. Вы можете насладиться этой частью, узнавая больше о ключевых фигурах и достижениях квантовой физики.

Глупые предположения

Я не предполагаю, что у вас есть какие-либо знания по квантовой физике, когда вы начинаете читать эту книгу. Однако я делаю следующие предположения:

- » Вы проходите университетский курс квантовой физики или интересуетесь тем, как математика описывает движение и энергию материи на атомном и субатомном уровнях.
- » У вас есть определенные математические навыки для понимания материала, начинающегося в главе 7. В частности, вы знаете математический анализ и тригонометрию, умеете пользоваться таблицей дифференциальных уравнений. Также у вас есть некоторый опыт работы с линейной алгеброй в описании гильбертова пространства.
- » Желательно иметь базовые знания классической физики. Если вы прошли годовой курс физики в колледже (или знаете все из книги «Физика для чайников»), у вас должна быть прочная база фундаментальных концепций.

Обозначения, принятые в книге



ПОДСКАЗКА

На полях этой книги вы встретите значки, которые привлекают внимание к определенным типам полезной информации. Вот эти значки и их краткое описание.



ЗАПОМНИ

Значок «Совет» отмечает подсказки и приемы, которые помогут вам легче освоить квантовую физику.



ТЕХНИЧЕСКИЕ
ДЕТАЛИ

Значок «Запомните» выделяет особенно важную информацию. Чтобы выделить самое главное в каждой главе, просто просмотрите места, отмеченные этими значками.

Значок «Технические детали» отмечает информацию сугубо технического характера, которую обычно можно пропустить.



Значок «Внимание» говорит: будьте внимательны! Он отмечает важную информацию, которая поможет избежать проблем, в основном связанных с распространенными заблуждениями о квантовой физике.

Помимо книги

Помимо обилия информации и рекомендаций по квантовой физике, представленных в этой книге, вы получите доступ к дополнительной помощи и информации онлайн на сайте Dummies.com. Ознакомьтесь со шпаргалкой к этой книге; просто зайдите на www.dummies.com и найдите «Шпаргалку по квантовой физике для чайников».

Навигация

Эта книга не предназначена для линейного чтения, поэтому вы можете перемещаться по содержанию по мере необходимости. Если вы интересуетесь квантовой физикой, но не имеете серьезной научной подготовки, начните с самого начала, с главы 1, и продвигайтесь дальше. Если вы считаете, что хорошо разбираетесь в классической физике и хотите сосредоточиться только на квантовых явлениях, можете пропустить главу 2. Если у вас есть хорошее понимание концептуальных элементов квантовой физики и вы действительно хотите узнать, как работать с математикой, вспоминайте таблицы дифференциальных уравнений и переходите прямо к главе 7.

А если вас интересует конкретная тема, которую я не упомянул в предыдущем абзаце, вы можете найти ее в оглавлении (в начале книги) или в предметном указателе (в конце книги).

1

**НАЧАЛО
РАБОТЫ
С КВАНТОВОЙ
ФИЗИКОЙ**

В ЭТОЙ ЧАСТИ...

Узнаете об основных понятиях, лежащих в основе квантовой физики.

Изучите соответствующие понятия классической физики.

Погрузитесь в основные эксперименты и открытия квантовой физики.

- » Закладываем фундамент физики
- » Определяем ключевые элементы квантовой физики
- » Понимаем масштабы квантовой физики
- » Размышляем об экспериментах и их результатах

Глава 1

Что же такое квантовая физика?

На протяжении двадцатого века квантовая физика преобразила наш мир. Человечество прошло путь от сомнений в существовании атомов до овладения атомной энергией. Люди также использовали понимание атомов и субатомных частиц для создания компьютеров из микроскопических транзисторов — достижений, ставших возможными благодаря квантовой физике.

Дома по всему миру питаются потоками электронов — субатомных частиц, которые хотя и были открыты, но оставались малопонятными до появления квантовой физики. Первые компьютеры хранили информацию на физических картах, но затем перешли на использование магнетизма — как на жестких дисках, так и на гибких дискетах. Одно время человечество хранило информацию на компакт-дисках, которые машины считывали с помощью лазеров (еще одного продукта квантовой физики). Теперь распространенным носителем информации стали твердотельные накопители (SSD), построенные на полупроводниках (еще одно достижение квантовой физики), а большинство людей носят в карманах микросуперкомпьютеры (смартфоны).

В этой главе я представляю обзорное обсуждение перехода от классического к квантовому пониманию материи и энергии. Я кратко рассказываю о мире до открытия квантовой физики, а затем знакомлю с ключевыми особенностями, которые физики обнаружили, когда впервые начали исследовать квантовую природу реальности. Я объясняю, почему люди не наблюдают эти квантовые эффекты в повседневной жизни, и как совершенствование технологий позволяет сначала увидеть их, а затем развить эти представления для расширения физических знаний.

Классика: предквантовая физика

По своей сути, физика — это научное изучение фундаментальных элементов физической реальности: материи и энергии. По мере усложнения физической структуры, когда материя и энергия принимают форму смешанных химических веществ или, скажем, белок, научное исследование переходит в область химии и биологии. Но если речь идет о базовом изучении материи и энергии — значит, вы говорите о физике.

Конечно, любая научная область имеет множество субдисциплин. Если вы изучаете белку, например, вы занимаетесь не просто биологией, а зоологией (наукой о животных). Если вы исследуете, как желудь превращается в дерево, это будет биология, но также и ботаника (наука о растениях).

Если же вы изучаете траекторию желудя, брошенного рассерженной белкой с дерева — это физика. Но это также и конкретная область кинематики. Физика включает множество подразделов, в том числе термодинамику (изучение тепловой энергии), оптику (изучение света) и электромагнетизм (изучение электричества и магнетизма).



ЗАПОМНИ

На протяжении всей книги я исхожу из того, что вы, читатель, имеете общее представление об основных идеях классической физики. Глава 2 посвящена многим разделам классической физики, изучающим материю и энергию в различных формах и структурах. И по мере того как эти исследования становились все более детальными, они оставляли вопросы, которые в конце девятнадцатого века заложили основу для открытия совершенно новой области физики — квантовой физики.

Что делает физику квантовой?

Квантовая физика относится к серии открытий первой половины двадцатого века и научным объяснениям этих открытий. Полученные в результате представления произвели революцию в понимании материи и энергии на мельчайшем уровне и вызвали трансформацию фундаментального способа, которым физики описывают и осмысливают физическую реальность этих структур. Подробно об этих революционных открытиях и экспериментах я расскажу в главе 3.

Но каковы же ключевые идеи, которые отличают квантовую физику от предшествующей ей физики? Несколько принципиальных различий имеют центральное значение для понимания того, чем квантовая физика отличается от классической.

- » Квантование: Физические величины измеряются в дискретных единицах, пакетах или квантах, которые невозможно разделить на более мелкие части.
- » Неопределенность и вероятность: Системам присуща внутренняя неопределенность.

Большая часть этой книги посвящена тому, как эти две идеи взаимодействуют друг с другом и проявляются в квантовых физических системах, а также вытекающим из них следствиям.

Примечание: Эти следствия часто кажутся противоречащими интуиции.



ПОДСКАЗКА



ЗАПОМНИ

Главное заблуждение, которое нужно преодолеть при изучении квантовой физики, заключается, если говорить прямо, в том, что вы действительно понимаете, как устроена Вселенная.

В квантовой физике, когда ваша рука лежит на столе, вы видите не два твердых физических объекта. Вы наблюдаете два поля частиц, взаимодействующих друг с другом определенным образом. Оба состоят в основном из огромного пустого пространства, но каким-то образом все равно отталкиваются друг от друга. Представлять эту ситуацию как давление двух твердых поверхностей друг на друга не ошибочно, просто это не отражает процессов, происходящих на квантово-механическом уровне. Твердые поверхности, которые вы видите и чувствуете, — это результат всех более фундаментальных квантово-физических взаимодействий.

Дело масштаба, или масштаб дел

Физики так долго не могли обнаружить эти квантовые элементы физической реальности отчасти потому, что они становятся заметными только на чрезвычайно малых масштабах. В повседневной жизни люди взаимодействуют с крупными, макроскопическими системами.

Стоит отметить, что означает слово *большой* в данном контексте. По оценкам, в песчинке содержится от 1 квинтиллиона до 100 квинтиллионов атомов. Эта оценка означает более 100 000 000 000 000 000 000 (10^{20}) атомов в одной песчинке — примерно столько же, сколько звезд во Вселенной. При этом песчинка настолько велика, что для описания ее поведения не нужно учитывать квантовую физику.

В таких больших системах (относительно говоря) квантовые эффекты размываются. Поэтому, хотя каждый отдельный атом подвержен квантовой неопределенности, когда вы рассматриваете все 100 квинтиллионов атомов в песчинке, все эти квантовые неопределенности

взаимно компенсируются. При рассмотрении песчинки как целого оставшаяся квантовая неопределенность становится совершенно несущественной.



ЗАПОМНИ

Физики начали замечать квантовые явления только после того, как смогли изучать отдельные атомы или, что еще важнее, заглянуть *внутри* отдельного атома — например, когда они исследовали электроны внутри атома или структуру атомного ядра. Именно на этом микроскопическом уровне квантовое поведение стало по-настоящему очевидным.

Открытия в квантовой физике позволили физикам наконец начать понимать, что происходит внутри атомов. Современное понимание атомных структур полностью основано на квантовой физике, хотя макроскопические физические структуры, состоящие из этих атомов — будь то песчинка, белка или планета, — не проявляют тех квантовых свойств, которые можно наблюдать при изучении их мельчайших составляющих.

Измерения и наблюдаемые величины: Почему ученые знают, что квантовая физика верна

Квантовая механика — это способ тщательного анализа квантовых физических явлений и описания наблюдаемых результатов измерений в квантово-механических экспериментах. Хотя эта область науки опирается на некоторые ключевые идеи, квантовая механика во многом развивается благодаря тому, что используемые в ней уравнения работают. Эти уравнения сложны и запутанны; потребовались годы математических и физических исследований, чтобы полностью их понять. Но когда вы разбираетесь в том, как работают эти уравнения, они дают информацию, которая согласуется с наблюдаемыми результатами экспериментов.

Поскольку квантовая физика опирается на явления, с которыми люди не сталкиваются в повседневной жизни, одна из главных сложностей для изучающих квантовую физику — научиться полагаться на абстрактные представления, которые противоречат естественной интуиции.

По сравнению с квантовой физикой изучение классической физики — это просто детская забава, потому что у людей есть естественная интуиция, которая полностью согласуется с классической физикой. Многие дети могут бросить мяч под нужным углом так, чтобы другой ребенок его поймал. (Не я, конечно, но многие другие дети могли это делать.)

Правильные эксперименты

Исследователи знают, что для доказательства истинности любого научного утверждения объяснение должно соответствовать результатам экспериментов. Во многих случаях экспериментальные данные довольно хорошо согласуются с интуитивными представлениями, но иногда для принятия результатов приходится осознать, что интуиция нас подводит.



ПОДСКАЗКА

Практически все открытия в квантовой физике связаны с осознанием того, что наша интуиция ошибочна.

Возьмем исторический пример: еще со времен Античности мыслители считали, что тяжелые предметы падают быстрее легких. Это очень интуитивное представление, и, вероятно, большинство детей и сегодня предположили бы именно так.

Эта идея не только интуитивно понятна, но даже подтверждается простыми экспериментами. Если взять два шара одинакового размера, но один из свинца, а другой из пенопласта, то в простом эксперименте свинцовый шар упадет первым. Однако если провести более тщательный эксперимент, исключая влияние сопротивления воздуха, то можно обнаружить то же, что открыли ученые (или «натурфилософы») несколько веков назад: оба шара падают с абсолютно одинаковой скоростью. Любая экспериментально наблюдаемая разница в скорости падения на самом деле не зависит от их массы. (Подробнее о законах движения, которые из этого следуют, вы узнаете в главе 2.)



ЗАПОМНИ

Недостаточно было просто провести эксперимент — ученым нужно было понять, как провести правильный эксперимент. В истории науки нередко правильные эксперименты становились возможными благодаря изобретению новых технологий, таких как микроскоп или телескоп, которые позволяли проводить исследования, недоступные невооруженному глазу.

Аналогично, технологии промышленной революции принесли с собой на заре двадцатого века возможности для проведения правильных экспериментов — многие из них описаны в главе 3, — которые позволили ученым раскрыть квантовую природу реальности.

Доверяй, но проверяй правильные тесты

Когда результаты эксперимента противоречат интуиции ученых, они понимают, что их интуиция ошибочна — хотя и не всегда мгновенно. В истории науки немало случаев, когда ученые поспешно принимали убеждения, которые позже оказывались неверными.

Как однажды сказал знаменитый теоретик Ричард Фейнман (о котором я рассказываю в Главах 3, 5 и 16):

Первый принцип заключается в том, что нельзя обманывать самого себя, а себя обмануть легче всего.

Здоровый скептицизм — основа науки. В идеале ученые тщательно перепроверяют собственные результаты несколько раз, прежде чем делиться ими. Но если исследователь поторопился и, возможно, нарушил первый принцип Фейнмана, то научное сообщество должно быть готово проявить скептицизм. Любой ученый хотел бы быть способным опровергнуть популярное научное утверждение. Это немного проще, чем выдвинуть совершенно новую теорию (и почти так же увлекательно).

Изучая историю квантовой физики, особенно в главах 3 и 6, вы увидите разногласия между учеными по поводу правильного понимания результатов физических экспериментов. И даже когда физики соглашались с базовыми концепциями решения задач квантовой физики, у них возникали еще более глубокие разногласия в интерпретации этих решений!



ЗАПОМНИ

Однако на протяжении последнего столетия результаты квантовой физики снова и снова подвергались проверке, и они неизменно оказывались согласующимися с математическими решениями теории. Несмотря на серьезные разногласия в интерпретации и понимании этих решений, физики откладывают споры в сторону и продолжают применять квантовую физику для создания ускорителей частиц, экзотических сверхтекучих состояний материи, полупроводников и транзисторов, постоянно раздвигая границы человеческих возможностей.

ЗАПУТАННОСТЬ И НЕЛОКАЛЬНОСТЬ

Одно из важных понятий квантовой физики называется *запутанностью*. Это означает, что квантовые состояния частиц оказываются связанными друг с другом в результате их предшествующего взаимодействия.

Классический пример этого довольно прост: предположим, у меня есть две монеты достоинством в один пенни, одна отчеканена в 1967 году, другая — в 1999. Не глядя ни на одну из монет, я даю вам одну из них. У этой системы может быть только два возможных состояния:

- У вас монета 1967 года, а у меня — 1999 года.
- У вас монета 1999 года, а у меня — 1967 года.

Эти пенни запутаны. Как только кто-то производит измерение (смотрит на) одной из монет, все мгновенно узнают, в каком состоянии находится другая монета, даже если ее не измеряли.

В классическом понимании это довольно очевидно. Проблема в том, что в квантовой физике (по крайней мере, в наиболее распространенной интерпретации) оба состояния фундаментально неопределенны до момента измерения. Это означает, что в квантовой физике присутствует внутренняя нелокальность, то есть две частицы, находящиеся далеко друг от друга, могут быть связаны способом, который не поддается объяснению с точки зрения классической логики. Точнее говоря, создается впечатление, что частицы могут обмениваться информацией быстрее скорости света.

Я подробнее рассматриваю эти концепции в главе 6, поскольку они являются ключевыми элементами, которые различные интерпретации квантовой физики пытаются объяснить, а критики квантовой физики пытаются использовать в своих аргументах.

В ЭТОЙ ГЛАВЕ...

- » Знакомство с движением и классической механикой
- » Погружение в математику и физику волн
- » Понимание того, как свет проявляется как электромагнитные волны
- » Изучение классического понимания материи и энергии
- » Описание неопределенности и вероятности

Глава 2

Стоя на плечах гигантов: Классическая физика

На протяжении большей части этой книги я поведу вас в путешествие по таинственному квантовому миру — миру микроскопических объектов и элементарных частиц — где не действуют привычные правила, управляющие материей и энергией, которые, как людям кажется, они наблюдают в нашей вселенной. Но чтобы понять значимость того, что вы увидите во время этого исследования, вам сначала нужно разобраться в тех законах материи и энергии, к которым люди привыкли. То есть вам необходимо понять основы классической физики.

Термин *классическая физика* по существу относится к любым концепциям и теориям физических систем, которые были общепринятыми начиная примерно с конца 1600-х годов и до начала двадцатого века. Или, другими словами, классическая физика в целом охватывает все от того, что знал Исаак Ньютон к моменту своей смерти, до того, что изучил Альберт Эйнштейн перед началом работы над докторской диссертацией (после чего он, можно сказать, совершил революцию). Если вы изучали физику в школе, то большая часть пройденного материала, вероятно, относилась к классической физике.

В этой главе я рассматриваю некоторые ключевые идеи классической физики и закладываю основу для расширения этих же идей в квантовую область. В частности, я рассматриваю поведение материи при

движении и воздействии на нее сил. Затем я обращаюсь к концепциям математики и физики волн, включая то, как это связано с многовековым спором о фундаментальной природе света. После объяснения доквантового разрешения этого спора я кратко исследую, что классическая физика выявила о существовании атомов и передаче энергии. И завершаю обсуждением вероятности и неопределенности в классической физике; эти математические концепции являются центральными для понимания квантовой физики.

Объекты в движении: классическая механика

Истоки физики как науки выросли из попыток людей понять движение объектов. Объектов, катящихся по земле. Объектов, брошенных в воздух. Падающих объектов. Небесных тел, движущихся по небосводу.

На этом пути можно встретить несколько очень полезных мыслителей — особенно Николая Коперника (1473–1543), Иоганна Кеплера (1571–1630) и Галилео Галилея (1564–1642) — но детали их открытий достигли кульминации в работе сэра Исаака Ньютона и описанных им законах движения. Работа Ньютона заложила основу физики движения, или классической механики.

Ньютон устанавливает правила

Достижения Исаака Ньютона (1643–1727) включают определение законов всемирного тяготения и законов оптики, наряду с изобретением дифференциального и интегрального исчислений. А затем он также создал три закона движения, на которых я сосредоточусь для введения в классическую механику.

Ньютон довольно всесторонне изложил свои открытия в своем шедевре 1687 года «*Математические начала натуральной философии*». Эта книга содержала три главных вклада Ньютона в классическую механику:

- » Закон всемирного тяготения
- » Законы движения
- » Математический анализ (дифференциальное и интегральное исчисление)

Описание движения

Большая часть классической механики так или иначе связана с тремя законами движения. Законы движения — это три утверждения о связи между движением объекта и действующей на него силой.

- » **Первый закон:** Закон инерции гласит, что состояние движения объекта изменится, только если на объект действует сила. В ситуации без воздействия сил или если действие всех сил скомпенсировано состояние движения объекта — это движение по прямой линии с постоянной скоростью (или покой, если скорость объекта равна нулю).
- » **Второй закон:** $F = ma^1$ — это строгая математическая формулировка того, как сила (F), действующая на тело, преобразуется в ускорение (a) этого тела. Величина m в уравнении обозначает массу тела.
- » **Третий закон:** Закон действия и противодействия гласит, что сила, действующая между телами, всегда работает в обоих направлениях. Ни одно физическое тело не может воздействовать на объект, не испытывая при этом обратного воздействия от этого объекта.

Начальная часть вводного курса физики в значительной степени посвящена тому, как определить силу или ускорение в конкретной ситуации, или как различные силы (включая силы противодействия из третьего закона) связаны между собой.



ПОДСКАЗКА

Первый закон Ньютона на самом деле описывает частный случай его второго закона². Если на тело не действует никакая сила, то $F = 0$, что означает, что $a = 0$ всякий раз, когда нет силы. И если нет никакого ускорения, это значит, что тело, на которое не действует сила, либо остается в состоянии покоя, либо движется по прямой линии. Аналогично, если $a = 0$, то из уравнения следует, что $F = 0$.

¹ Строго говоря, лучше этот закон представлять в виде $\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m}$, тем самым указывая, что сила порождает ускорение, а не наоборот. Также не стоит забывать, что сила и ускорение — это векторные величины, имеющие не только значение, но и направление.

² Первый закон Ньютона на самом деле постулирует существование особых систем отсчета, в которых тело действительно либо покоится, либо движется по прямой с постоянной скоростью, если на него ничего не действует или действие всех сил скомпенсировано. Такие системы отсчета называются инерциальными. Второй же закон Ньютона выполняется ТОЛЬКО в инерциальных системах отсчета, он эти системы отсчета как будто бы «использует». (Прим. науч. ред.)

Применение математического анализа к движению

Используя свои законы движения, Ньютон затем применил изобретенные им дифференциальное и интегральное исчисления для определения сил, действующих на движущиеся тела. Это легло в основу его закона всемирного тяготения, или закона гравитации. Он также подтвердил, что его объяснение и математические выкладки согласуются с эллиптическими орбитами планет, описанными Кеплером годами ранее.



ПОДСКАЗКА

И сила, и ускорение являются векторами, что означает, что они характеризуются не только величиной, но и направлением. Масса, с другой стороны, является скалярной величиной, то есть имеет только величину, но не имеет связанного с ней направления.



ЗАПОМНИ

И знаете что? Единица измерения силы, которую используют физики, называется — вы не поверите — *ньютон*! Она обозначается буквой Н, и 1 Н равен $1 \text{ кг} \cdot \text{м} / \text{с}^2$. Если применить второй закон к массе в 1 кг, которая ускоряется ровно на $1 \text{ м} / \text{с}^2$, то действующая сила будет равна точно 1 Н.

Кинетическая энергия и импульс

Помимо силы, действующей на тело, еще двумя ключевыми понятиями, применяемыми в классической механике, являются энергия и импульс в некоторой системе отсчета, относительно которого движение этого тела рассматривается

Энергия — это способность совершать работу. Она может проявляться различными способами, но для начала я сосредоточусь на энергии движения, или *кинетической энергии*. Эта энергия проявляется, когда объект массой m движется со скоростью v . Зная только массу и скорость, можно вычислить кинетическую энергию (КЕ) объекта по следующей формуле:

$$\text{КЕ} = \frac{1}{2}mv^2$$

Единицей измерения энергии является джоуль (Дж), в уравнении $1 \text{ Дж} = 1 \text{ кг} \cdot \text{м}^2 / \text{с}^2$. Хотя объект движется в определенном направлении, кинетическая энергия является скалярной величиной (имеет только числовое значение). Энергия никогда не имеет направления.

Определение импульса, когда направление имеет значение

Если направление имеет значение, следует обратиться к *импульсу*, а не к энергии. Переменная для импульса — p , что происходит от термина *impetus*, который использовался для этого понятия в донью-

тоновские времена. Поскольку переменная m уже используется для массы, использование m для обоих параметров было бы запутанным, поэтому физики продолжают использовать p для импульса. Заметьте, что импульс p также вычисляется непосредственно только из массы m и скорости v по следующей формуле:

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v}$$

И $\mathbf{p}$, и $\mathbf{v}$ выделены жирным шрифтом в уравнении, чтобы показать, что это векторы, имеющие величину и направление. При работе с векторной величиной недостаточно знать только ее значение. Важно также знать направление или ориентацию вектора. Два вектора могут иметь одинаковую величину, но отличаться друг от друга, если они указывают в разных направлениях. На рисунке 2-1 показан пример с двумя векторами скорости, $\mathbf{v}_1$ и $\mathbf{v}_2$.

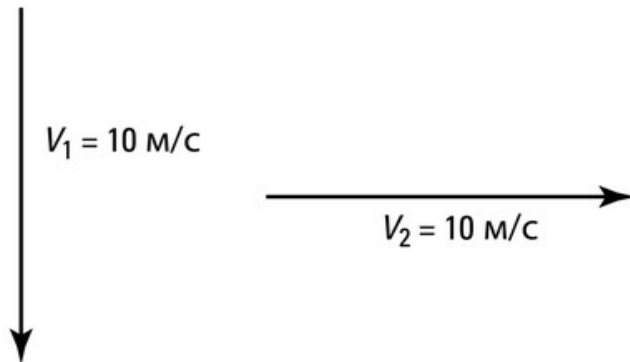


РИСУНОК 2-1.

Два вектора, имеющие одинаковую величину, но разные направления.

Однако масса m в этом уравнении является скаляром. Умножение вектора на положительное число никогда не изменит направление получающегося произведения. Другими словами, импульс $\mathbf{p}$ всегда будет направлен точно в том же направлении, что и скорость $\mathbf{v}$. Так, если объект массой 10 килограммов движется со скоростью 5 метров в секунду строго вправо, импульс будет равен $50 \text{ кг}\cdot\text{м/с}$ и направлен также строго вправо.



ПОДСКАЗКА

В отличие от силы или энергии, импульс не имеет собственной единицы измерения. Он измеряется в составных единицах $\text{кг}\cdot\text{м/с}$. Если бы физикам была остро необходима отдельная единица измерения импульса, они, вероятно, определили бы ее, но в этом нет особой необходимости. В реальных физических задачах физики редко ищут импульс как конечную цель, а скорее используют его как промежуточный шаг для определения результата, связанного с другими неизвестными величинами, такими как сила, скорость, ускорение, энергия или масса.

Фокус на кинетической энергии – хотя существуют и другие виды

Поскольку и кинетическая энергия, и импульс напрямую вычисляются через массу и скорость, вы, возможно, заметили сходство между этими уравнениями. На самом деле можно полностью исключить необходимость в скорости и записать уравнение кинетической энергии так, чтобы оно зависело только от импульса и массы, в виде:

$$KE = \frac{p^2}{2m}$$

Векторы важны в физике, включая и квантовую физику, поэтому важно еще раз отметить, что импульс — это вектор, а энергия — скаляр. Но в уравнении кинетической энергии, когда вы умножаете импульс на самого себя (возводите в квадрат), направленность исчезает в этом процессе, и в результате получается просто скалярная величина¹.



Если вы знакомы с математическим анализом, то, возможно, заметили, что импульс (mv) является производной от кинетической энергии ($\frac{1}{2}mv^2$) по скорости. Ньютон изобрел математический анализ, потому что это было удобно для работы в подобных ситуациях, хотя уравнения кинетической энергии и импульса можно вывести и без использования математического анализа.

В этом разделе я сосредотачиваюсь исключительно на кинетической энергии (энергии движения), но вот лишь несколько других форм энергии:

- » Гравитационная потенциальная энергия: энергия, которой обладает объект из-за того, что его положение в гравитационном поле может меняться
- » Тепловая энергия: энергия внутри системы, определяющая ее температуру
- » Электрическая энергия: энергия, связанная с силами, действующими на заряженные частицы, и их движением
- » Химическая энергия: энергия, хранящаяся в связях между атомами и молекулами
- » Ядерная энергия: энергия, содержащаяся внутри атомного ядра

¹ Здесь используется так называемое *скалярное произведение* векторов, результатом которого действительно является скаляр — число. Существует также векторное произведение двух векторов, результатом которого является уже вектор. (Прим. науч. ред.)

Ловя волны

Один из способов проявления энергии через движение — это волны. Большинство людей, не связанных с физикой, чаще всего думают о волнах как о движении жидкостей, потому что ассоциируют волны с походом на пляж. Но физики обнаружили, что это простое, повторяющееся движение (волна) является одним из понятий, которое наиболее часто встречается в природных системах. Волны можно найти не только в движении жидкостей, но и при рассмотрении распространения звука.

Движение грузов, подвешенных на маятниках или пружинах, демонстрирует повторяющееся движение вокруг точки равновесия в виде регулярных колебаний, что делает их идеальными для описания с помощью классических волн. Глава 9 посвящена квантово-физическому подходу к осцилляторам.

Некоторые свойства волнового фронта

Волны обладают некоторыми общими характеристиками, которые проявляются при любых обстоятельствах, независимо от типа рассматриваемой волны. Проще всего их продемонстрировать на примере механической волны, как показано на рисунке 2-2.



РИСУНОК 2-2.
Пример волны.

К общим характеристикам волн относятся:

- » **Амплитуда (A):** Амплитуда — это максимальное отклонение волны от положения равновесия. Характер этого отклонения может проявляться в виде:
 - *Постоянной амплитуды* (см. рисунок 2-2). Получающиеся *непрерывные волны* имеют одинаковое отклонение на каждом цикле.

- *Модулированной амплитуды*, где отклонение меняется со временем и/или положением. На шкале старого радиоприемника буквы АМ означают «амплитудная модуляция», поскольку именно так радиосигнал кодируется информацией. Амплитуда измеряется в единицах длины, которые имеют смысл в зависимости от размера волны.

- » **Гребень:** Верхняя точка волны. Высота гребня в механической волне равна координате положения равновесия плюс амплитуда.
- » **Впадина:** Нижняя точка волны. Глубина впадины в механической волне равна координате положения равновесия минус амплитуда.
- » **Период (T):** Промежуток времени, необходимый для завершения одного колебания, цикла или вибрации.
- » **Частота (f):** Количество волн, циклов или колебаний, происходящих в единицу времени. Частота является величиной, обратной периоду.
- » **Длина волны (λ):** Расстояние между двумя последовательными идентичными точками волны. Обычно это расстояние измеряется от гребня до гребня или от впадины до впадины.
- » **Скорость (s):** Расстояние, пройденное определенной точкой волны за данный интервал времени. Скорость равна длине волны, деленной на период $s = \lambda/T$, или длине волны, умноженной на частоту $s = \lambda f$.

На рисунке 2-3 показаны две простейшие математические волны, связанные с тригонометрическими функциями синуса и косинуса. Синусоидальная волна особенно полезна, поскольку при нулевом

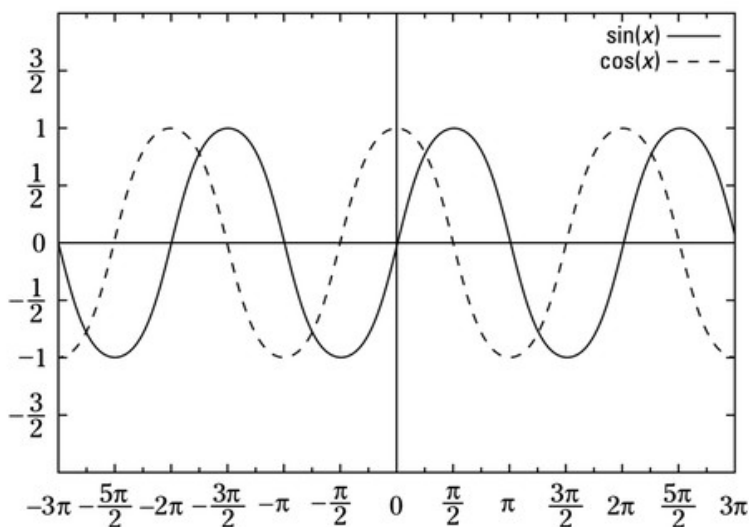


РИСУНОК 2-3:
График функций синуса и косинуса.

входном значении выходное значение также равно нулю. Удобным инструментом в физике (включая квантовую физику) является определение или переопределение переменных таким образом, чтобы можно было применить знания об этих тригонометрических функциях для решения задачи.

Говоря о классических волнах в целом, существует два различных физических типа, которые изображены на рисунке 2-4.

- » Поперечная волна: Волна, колеблющаяся перпендикулярно направлению распространения. Например, волна на воде колеблется вверх и вниз, в то время как сама волна движется горизонтально вдоль поверхности воды.
- » Продольная волна: Волна, колеблющаяся в направлении распространения. Например, в случае звука молекулы воздуха колеблются в том же направлении, в котором распространяется звук, удаляясь от источника звука.

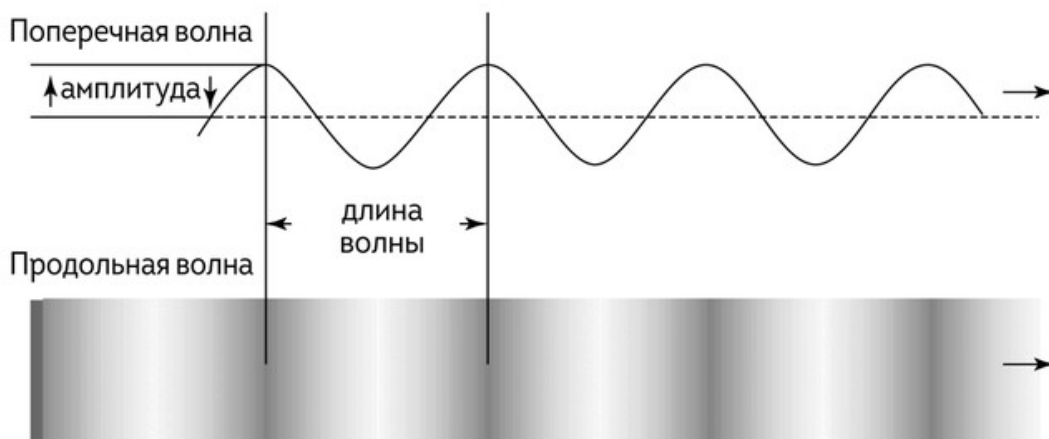


РИСУНОК 2-4.

Существует два типа волн – поперечные (показаны сверху) и продольные (показаны снизу).

Будь то гармоника звуковых волн или периодическое движение массы на пружине (которое я кратко рассматриваю в главе 9), традиционные физики используют волновые характеристики для моделирования физического поведения этих систем. Математика волн также становится центральной и в квантовой физике.

Интерференция и суперпозиция волн

Когда имеешь дело с волнами, необходимо четко понимать, как взаимодействуют две разные волны. Если кратко, волны накладываются друг на друга, образуя *суперпозицию* двух волн. Вместо того чтобы рассматривать две отдельные волны, суперпозиция позволяет говорить об одной единой волне.

Возьмем, к примеру, физические волны на поверхности воды. Когда вы наблюдаете смешение волн от двух источников, сталкивающиеся волны не остаются отдельными различимыми волнами. Два волновых фронта¹ превращаются в общее колебание воды, где результатом действия двух источников становится совокупность волн, которые уже невозможно отличить друг от друга. Вы наблюдаете суперпозицию двух волн.

Результатом суперпозиции является *интерференция*. Рассмотрим две физические волны на воде, абсолютно равные по интенсивности и накладывающиеся друг на друга. Если при столкновении одна волна находится в верхней точке (на гребне), а другая — в нижней точке (во впадине), то результирующая суперпозиция волн в этой точке будет абсолютно плоской. Гребень и впадина взаимно погасят друг друга.

Процесс сложения значений двух волн называется *интерференцией* и имеет два крайних случая:

- » Деструктивная интерференция (как в предыдущем примере) происходит, когда гребень и впадина равной интенсивности взаимно погашают друг друга, и волна исчезает.
- » Конструктивная интерференция возникает, когда две волны накладываются так, что их гребни совпадают. В результате образуется новый гребень, равный сумме двух исходных гребней и, следовательно, более высокий, чем у каждой отдельной волны.

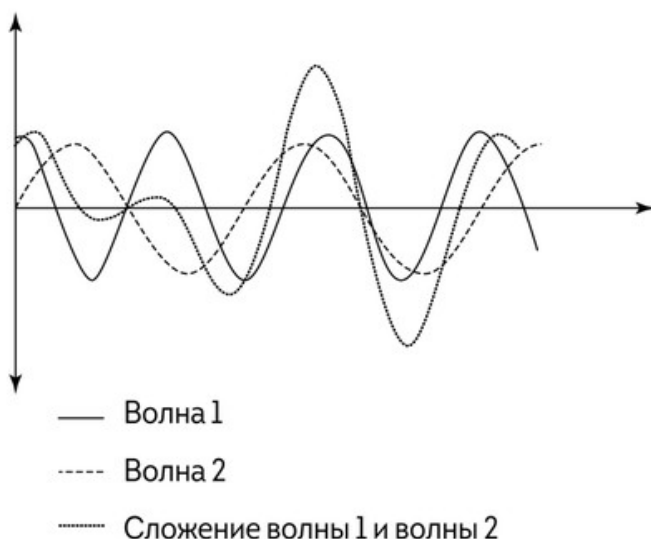


РИСУНОК 2-5.

Когда две волны накладываются друг на друга, полное смещение равно сумме двух отдельных смещений.

¹ Волновой фронт — это множество точек волны, колеблющихся одинаковым образом (в частности, в некоторый момент времени все эти точки находятся на одном гребне волны), также говорят, что такие точки колеблются в одинаковых фазах. (Прим. науч. ред.)

Разумеется, в большинстве случаев гребни и впадины не совпадают идеально, и интерференция происходит в промежуточной форме между деструктивной и конструктивной, как показано на рисунке 2-5.

Да будет свет

В период между Ньютоном и Эйнштейном одни из самых жарких физических споров велись вокруг природы света. Эти классические дебаты имеют ключевое значение для понимания квантовой физики.

Спор о природе света: корпускулы против колебаний

До работ Ньютона доминирующая теория рассматривала свет как колебания некой неизвестной среды. Другими словами, свет интерпретировался с позиций волновой теории, наиболее заметными сторонниками которой были голландский физик Христиан Гюйгенс (1629–1695) и французский философ Рене Декарт (1596–1650).



ЗАПОМНИ

Эти волновые теории света требовали наличия некой среды, в которой происходили колебания. Если свет подобен волне, распространяющейся по воде, должно существовать нечто, играющее роль воды даже в вакууме. Физики называли эту неизвестную среду для распространения света «эфиром», а иногда (более выразительно) — «светоносным эфиром».

Взаимодействие с препятствиями

Чтобы понять преимущества волновой концепции, нужно осознать, что свет от источника, похоже, распространяется во всех направлениях (если не блокируется). Это движение напоминает волны, расходящиеся во все стороны от точечного источника — например, когда вы опускаете палец в спокойную лужу.

Но еще важнее подумать о том, что происходит, когда на пути света возникает препятствие. Когда волны на воде встречают упавшее бревно, преграждающее им путь, достигнув края бревна, они не продолжают двигаться строго по прямой линии. Вместо этого они огибают бревно с другой стороны.

Нечто похожее происходит и с перекрытым светом. Если в коридоре горит свет, он распространяется вдоль коридора, но если в конце коридора находится большая комната, свет освещает не только то, что

лежит на прямой линии. Часть света расширяется, освещая предметы в комнате, не находящиеся непосредственно на пути коридора. Свет проходит через дверной проем и как будто огибает его края, стремясь осветить как можно больше пространства.

Этот процесс, когда свет встречает препятствие и стремится заполнить пространство вокруг него, называется *дифракцией*. На рисунке 2-6 показаны световые волны, падающие на металлическую пластину с небольшой щелью. Щель действует как новый источник света, от которого световые волны расходятся по другую сторону металлической пластины (препятствия).

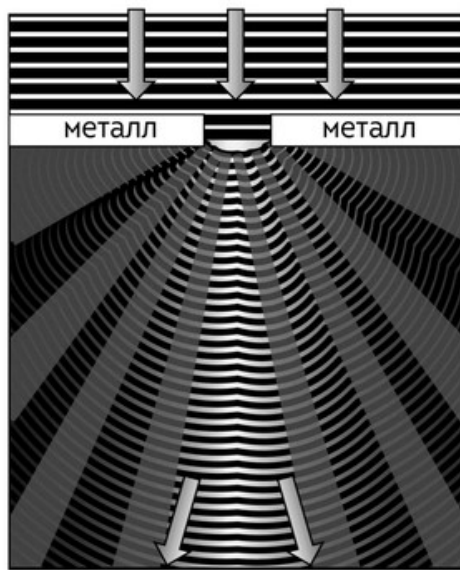


РИСУНОК 2-6.
Дифракция света на одной щели.

Теории, объясняющие поведение света

Чтобы объяснить это излучающее поведение, Гюйгенс предположил, что свет представляет собой не просто одиночную волну (которая всегда движется в одном направлении), а волновой фронт, который постоянно распространяет сам себя. В его теоретической модели света каждая точка вдоль волнового фронта излучает новые сферические волны во всех направлениях.



ЗАПОМНИ

Эта теория волнового фронта хорошо объясняла нелинейное поведение света. Проблема заключалась в том, что свет также демонстрировал несколько линейных свойств, которые модель Гюйгенса объясняла не особенно убедительно.

В книге Ньютона «Оптика» (1704) утверждалось, что эксперименты с отражением и преломлением света лучше всего объясняются, если предположить, что свет движется по прямым линиям. Поскольку

волны не обязательно движутся по прямым линиям, он предпочел объяснение, включающее маленькие частицы света, названные корпускулами, которые движутся по прямой линии с конечной скоростью. Эта корпускулярная теория света доминировала в физике почти столетие, пока новые эксперименты не заставили физиков снова задуматься о том, не имеет ли больше смысла рассматривать свет как волну.

Противоречие в опыте Юнга с двумя щелями

В 1802 году лондонский офтальмолог и физик Томас Юнг (1773—1829) начал то, что стало известно как эксперимент с двумя щелями. В этом эксперименте он использовал зеркала для направления луча света на оконное стекло, которое было по большей части закрыто так, что свет не мог через него проникнуть. Но в оконном стекле были две узкие щели, через которые свет мог проходить. По другую сторону оконного стекла находился темный экран, на котором отображался падающий на него свет.



ЗАПОМНИ

Если имеется одна щель, наблюдается явление дифракции (см. предыдущий раздел и рисунок 2-6), поэтому Юнгу пришлось правильно настроить эксперимент — с двумя щелями — чтобы избежать дифракции.

Рассмотрим два сценария и то, что можно было бы ожидать увидеть, когда луч света падает на оконное стекло Юнга:

- » Если бы свет состоял из частиц, движущихся по прямым линиям, как предполагал Ньютон, то предсказать, что появится на экране, было относительно просто. Свет, направленный на оконное стекло, либо ударялся бы о покрытие и останавливался, либо частицы, направленные соответствующим образом, проходили бы через одну из двух узких щелей. Другими словами, Юнг ожидал бы увидеть на экране две узкие полосы света, соответствующие корпускулам, которым случилось пройти через две узкие щели.
- » Если бы свет представлял собой распространяющийся волновой фронт, то наблюдения Юнга соответствовали бы его волновому поведению. Вместо двух узких лучей света, направленных в две полосы на экране, каждая из щелей (как источник новых цилиндрических волн) направляла бы эти два волновых фронта так, что они оба попадали бы на экран. Из-за волновых свойств на экране можно было бы увидеть интерференционную картину

от двух волн, которая проявлялась бы в виде серии чередующихся светлых и темных полос, как показано на рисунке 2-7. И именно такую картину наблюдал Юнг.

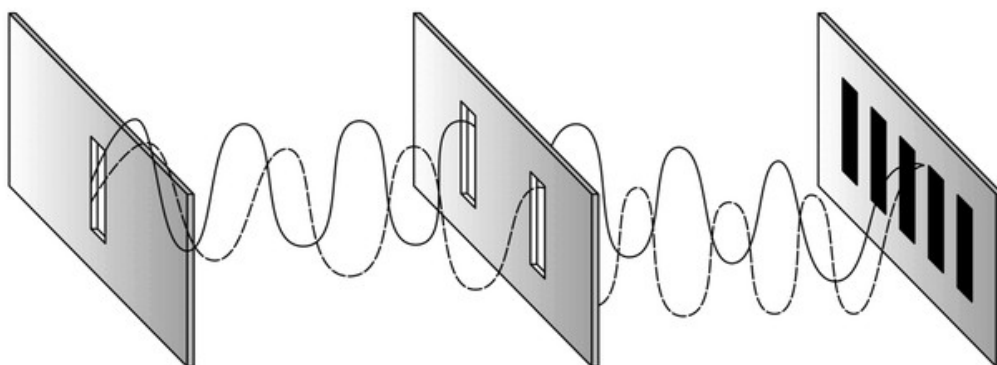


РИСУНОК 2-7.

Свет, проходящий через две щели как волна, создавал бы череду светлых и темных полос.



ЗАПОМНИ

Картина, наблюдаемая на экране в эксперименте Юнга, казалась совершенно несовместимой с корпускулярной теорией Ньютона, но прекрасно объяснялась с помощью модели волнового фронта Гюйгенса или подобной волновой модели света. Несмотря на то что почти столетие физики придерживались корпускулярной теории света Ньютона, им пришлось отказаться от идеи, что свет ведет себя как частица. Подход Ньютона к оптике все еще оставался полезной моделью для расчетов, но эксперимент Юнга явно продемонстрировал, что поведение света необходимо рассматривать как волновое.

По правде говоря, ни одна из моделей не давала ответы на все вопросы физиков. Ни корпускулярная, ни волновая модель полностью не охватывали всю сложность происходящего со светом. Однако в девятнадцатом веке физики решительно склонялись к волновой интерпретации света, что означало, что им снова приходилось иметь дело с загадочным эфиром. В главе 3 эксперимент с двумя щелями рассматривается в контексте квантовой физики.

Удивительные уравнения Максвелла

Помимо исследований в области оптики, девятнадцатый век ознаменовался потрясающим прогрессом в применении магнетизма и электричества для питания постоянно ускоряющейся промышленной революции. Работа Майкла Фарадея (1791–1867) и других ученых в этой области заслуживает гораздо более подробного рассмотрения, чем я привожу здесь. Всего за несколько десятилетий эти исследователи превратили силы, которые использовались для салонных фокусов со стеклянными колбами и магнитами, в строгую, глубоко математическую науку.

Объединение сил



ЗАПОМНИ

Важно отметить, что физики девятнадцатого века обнаружили глубокую связь между электричеством и магнетизмом как двумя проявлениями одной и той же фундаментальной силы: электромагнитной, действующей со стороны электромагнитного поля.

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЙ СПЕКТР

Физики также обнаружили, что видимый свет составлял лишь часть – причем довольно небольшую – существующего света. Уильям Гершель (1738–1822) открыл инфракрасное излучение в 1800 году. Годом позже Иоганн Вильгельм Риттер (1776–1810) обнаружил излучение в высокоэнергетической части спектра, которое впоследствии назвали ультрафиолетовыми лучами. К концу века физики обнаружили радиоволны, микроволны, рентгеновские и гамма-лучи.

Вот порядок различных типов электромагнитного излучения от низших энергий к высшим:

- Радиоволны
- Микроволны
- Инфракрасное излучение
- Видимый свет (красный, оранжевый, желтый, зеленый, голубой, синий и фиолетовый)
- Ультрафиолетовое излучение
- Рентгеновские лучи
- Гамма-лучи

Значительная часть квантовой физики связана с изучением излучения электромагнитной энергии при квантовых переходах, поэтому понимание того, что некоторые из этих переходов приводят к появлению невидимого света, оказалось весьма полезным.

Эта электромагнитная энергия переносилась электромагнитной волной — той же волной, что переносит свет. Причем не только видимый свет, который изучали Ньютон и Гюйгенс в оптике, но и другие формы невидимого света, которые только начинали открывать. (См. врезку «Электромагнитный спектр».) Электромагнитная волна показана на рисунке 2-8.

В двадцатом веке квантовая физика преобразила понимание как света, так и электромагнетизма. Но фундаментом для этой трансформации

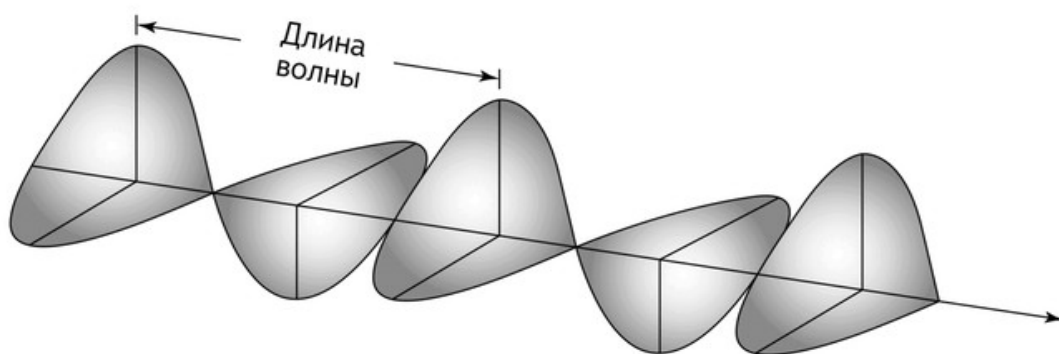


РИСУНОК 2-8:

Электрическое и магнитное поля синхронно колеблются в электромагнитной волне.

послужила удивительная работа, сделанная в девятнадцатом веке, когда физики обнаружили, что между явлениями, которые на первый взгляд кажутся совершенно различными, существуют глубокие математические связи.

Выражение связей с помощью математики

Электромагнитная волна получила свое полное математическое описание в виде четырех уравнений, известных как уравнения Максвелла — опубликованных в 1865 году и названных в честь Джеймса Клерка Максвелла (1831–1879). По правде говоря, он не получил все эти уравнения самостоятельно (что очевидно из того факта, что некоторые из них названы в честь разных ученых), но ему принадлежит заслуга объединения их в целостное математическое описание электричества, магнетизма и света в форме электромагнитных волн.

Несмотря на свою относительную краткость, эти уравнения содержат удивительно большой объем сложной информации. Среди прочего, Максвелл извлек из этих уравнений понимание того, что скорость распространения электромагнитного поля в точности совпадает со скоростью света, что привело его к осознанию глубокой и фундаментальной связи между этими явлениями.

Вот несколько пояснений, которые помогут вам интерпретировать уравнения Максвелла:

- » **Полужирные буквы** обозначают характеристики электрического поля (**E**) или магнитного поля (**B**), которые представлены векторными полями. (См. соседнюю врезку «Гравитация и электромагнетизм: физические поля».)
- » **Символ набла или дел, ∇** (который рассматривается в главе 7 при обсуждении векторных операторов), может представлять следующие три характеристики векторного поля **F** при использовании в векторном анализе:



- $\nabla \mathbf{F}$: Градиент $\mathbf{F}$
- $\nabla \cdot \mathbf{F}$: Дивергенция $\mathbf{F}$
- $\nabla \times \mathbf{F}$: Ротор $\mathbf{F}$

Уравнения Максвелла можно представить несколькими способами, но в таблице 2-1 показаны некоторые из их наиболее распространенных форм в виде дифференциальных уравнений.

ГРАВИТАЦИЯ И ЭЛЕКТРОМАГНЕТИЗМ: ФИЗИЧЕСКИЕ ПОЛЯ

Ньютон определил гравитацию как взаимодействие между точечными массами. Пьер-Симон Лаплас (1749–1827), живший после Ньютона, нашел другой способ рассмотрения гравитации, введя понятие гравитационного поля.

Это гравитационное поле изображало гравитацию в виде силовых линий, пронизывающих все пространство вокруг материального объекта, например Земли. В каждой точке вблизи Земли существует гравитационное поле, интенсивность которого зависит от массы Земли и расстояния от этой точки до центра Земли. Это гравитационное поле имеет не только величину в каждой точке, но и направление (в данном случае вниз, к центру тяжести Земли), что делает его векторным полем. Если в этом поле находится другая масса, то гравитационная сила между ней и Землей определяется их двумя массами способом, который точно совпадает с расчетами Ньютона.

Подход с использованием гравитационного поля стал особенно популярным в течение девятнадцатого века. Фактически, поля стали обычным способом осмысления физических идей, во многом потому, что это также был естественный способ работы с электромагнитными силами. Вместо гравитационного поля эти силы можно было интерпретировать как исходящие из электромагнитного поля, которое заполняло пространство вокруг любого заряда или тока. В частности, силовые линии, создаваемые магнитными полями вокруг магнита, можно даже увидеть с помощью железных опилок!

ТАБЛИЦА 2-1

Уравнения Максвелла

Уравнение	Как его называют
$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$	Теорема Гаусса

Уравнение	Как его называют
$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$	Теорема Гаусса для магнитного поля
$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$	Закон электромагнитной индукции Фарадея-Максвелла
$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \left(\mathbf{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right)$	Закон Ампера-Максвелла, обобщение закона полного тока Ампера

Эксперимент Майкельсона-Морли и загадочный отсутствующий эфир

К середине девятнадцатого века физикам, безусловно, казалось, что Ньютон определенно проиграл спор о природе света. Видимо, даже Ньютон не мог быть прав во всем. Уравнения Максвелла, казалось, полностью описывали поведение света как электромагнитных волн, а также электричества и магнетизма. Хотя оптические подходы Ньютона все еще оставались полезными для решения задач преломления и отражения света, все специалисты в этой области были уверены, что свет действительно является волной.

В поисках эфира

Однако оставался важный вопрос: в какой среде происходили эти колебания?

Стандартным ответом было то, что средой являлся эфир, или светоносный эфир (в зависимости от того, насколько изысканно вы хотели бы звучать), но проблема заключалась в том, что это по сути означало лишь «неизвестную субстанцию, передающую световые волны». Ведь свет мог распространяться через вакуум, поэтому если эфир был той средой, в которой происходили колебания, то он должен был быть веществом, пронизывающим все пространство. То, что физики вообще не могли его обнаружить, было, мягко говоря, серьезным препятствием.



ЗАПОМНИ

Хотя физики ничего не знали о том, как ведет себя эфир, они знали кое-что о поведении волн. Если среда движется, то волна, распространяющаяся в этой среде, будет подвержена ее влиянию. Возвращаясь к примеру с водой: волны на поверхности реки с текущим потоком движутся быстрее по направлению течения, чем к берегу реки.

Предполагалось, однако, что эфир, вероятно, неподвижен. Вероятно, он был какой-то фундаментальной составляющей вселенной. Но даже если эфир не двигался, физики знали, что Земля движется, а значит, все на Земле движется относительно эфира.

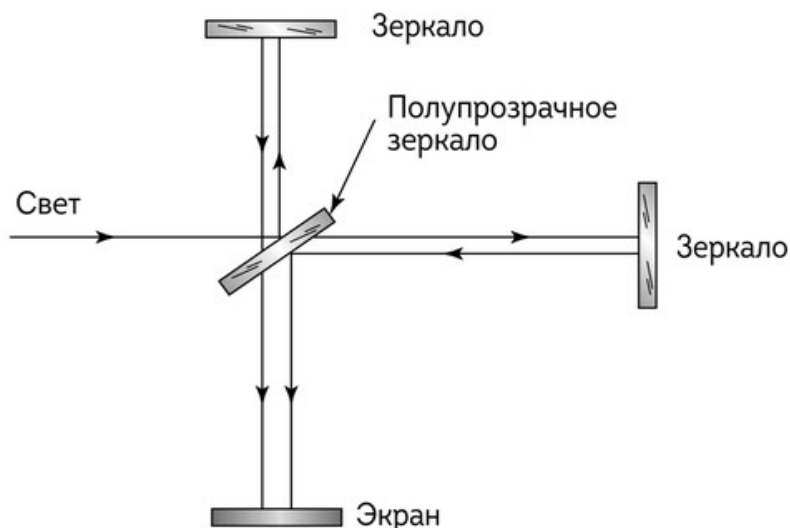


РИСУНОК 2-9:

Интерферометр Майкельсона-Морли направляет световые лучи по двум различным путям для их встречи на экране.

Чтобы попытаться обнаружить движение эфира с помощью этих знаний, физики создали устройство, называемое интерферометром. Существует несколько различных конструкций таких устройств, и на рисунке 2-9 показана схема интерферометра Майкельсона-Морли, которая хорошо иллюстрирует то, что я описываю в этом разделе.

Сравнение света на двух путях

Как же работает это устройство? Свет входит в прибор, и специальные зеркала позволяют части света проходить прямо, а часть света отклоняется в перпендикулярном направлении. Оба этих световых луча ударяются о другие зеркала и отражаются обратно, отскакивая от специального зеркала так, что оба направляются к экрану. При экспериментах с интерферометром ученые учитывали следующие параметры и допущения:

- » Расстояния между зеркалами одинаковы, поэтому два световых луча проходят ровно одинаковое расстояние по каждому пути до экрана. Если бы ничто другое не влияло на скорость света, то световые волны должны были бы быть в фазе друг с другом. Это означает, что на экране должно было бы наблюдаться яркое световое пятно.
- » Лучи света могли пройти одинаковое расстояние, но один из путей должен был двигаться либо по направлению движения эфира, либо против него. В таком случае, свет, прошедший по этому пути, должен был двигаться либо немного быстрее, либо немного медленнее света, прошедшего по другому пути. Когда два световых луча воссоединялись, теория эфира предсказывала, что их волновые

фронты должны были оказаться слегка не в фазе друг с другом, создавая интерференционную картину из светлых и темных полос на экране.



ЗАПОМНИ

Физики Альберт Майкельсон (1852–1931) и Эдвард Морли (1838–1923) провели серию экспериментов в 1887 году, надеясь обнаружить влияние эфира, но их результаты оказались катастрофическими (по крайней мере, для теории эфира). Ни одна из их попыток не выявила различий в скорости света вдоль разных путей. Это выглядело почти так, будто эфира вовсе не существовало!

Однако доказательства в пользу волновой теории к тому времени были настолько убедительными, что большинство физиков (включая самих Майкельсона и Морли) просто посчитали эксперимент неудачным. Никто всерьез не предлагал полностью отказаться от идеи эфира.

Лишь в 1905 году молодой физик по имени Альберт Эйнштейн серьезно отнесся к идее о том, что свет всегда движется с постоянной скоростью в пустом пространстве, сделав это одним из основных постулатов своей новой специальной теории относительности. Но это тема для другой книги. Некоторые другие открытия Эйнштейна 1905 года я рассматриваю в главе 3.

Атомы: строительные кирпичи материи

В своём сборнике лекций по физике «Дюжина лекций. Шесть попроще и шесть посложней» знаменитый физик Ричард Филлипс Фейнман (1918–1988) описывает гипотетическую катастрофу, уничтожающую все человеческие знания. В этом сценарии у него есть возможность передать будущим поколениям только одно предложение. Что это должно быть? Какую крупицу знаний можно предложить, чтобы вместить максимум информации в минимум слов? Фейнман выдвинул на эту роль *атомную гипотезу*:

«Все вещи состоят из атомов — крошечных частиц, находящихся в непрерывном движении, притягивающихся друг к другу на небольшом расстоянии, но отталкивающихся при сближении».

Больше о незаурядной личности Фейнмана и его вкладе в физику вы узнаете в главах 3, 5 и 16. К моменту, когда он сделал это утверждение, он, несомненно, обладал поразительными знаниями о квантовой структуре атома.



ПОДСКАЗКА

Удивительно то, что первая часть атомной гипотезы Фейнмана — «Все вещи состоят из атомов» — является одновременно одной из древнейших научных идей и удивительно современной.

Античный атомизм

Идея атома восходит к древним грекам, в первую очередь к Демокриту. Основной аргумент в пользу существования атомов сводился к следующему: невозможно бесконечно делить что-либо. В какой-то момент должна существовать конечная крошечная частица *чего-то*, которую уже нельзя разделить дальше. Это атомисты и называли атомом.

Эта идея то появлялась, то исчезала. Эпикур (341–270 гг. до н.э.), а позже и Лукреций были приверженцами идеи атомов. Но даже до появления полноценного научного метода исследования проблема этой идеи заключалась в том, что никому не удавалось достичь той точки, где они обнаружили бы атом. Независимо от того, насколько малым было что-либо, его всегда можно было разделить дальше. Платон высказывался в пользу атомов, но Аристотель был против, а мнение Аристотеля обычно брало исторический верх.

Идея атома периодически возникала на протяжении последующих тысячелетий, включая варианты атомной теории, выдвинутые Галилео Галилеем, Рене Декартом и Исааком Ньютоном, но только когда ученые получили доказательства, идея атомов получила широкое признание.

Химики открывают атом (возможно)

Химия развивалась на протяжении восемнадцатого века и признавала, что некоторые вещества являются элементами, которые нельзя разложить дальше. Другие вещества были соединениями, образованными путем комбинации нескольких элементов. Вода, например, получалась при соединении водорода и кислорода в правильном соотношении.

Британский химик Джон Дальтон (1766–1844) обобщил работы химиков в 1808 году, отметив, что соотношения элементов в получаемых соединениях всегда выражались целыми числами. Например, ни в каких собранных данных не было намека на то, что можно взять половину элемента кислорода и соединить его с одним элементом водорода, чтобы получить из этого молекулу.

Изученные элементы создавали впечатление, что их нельзя разложить дальше, поэтому Дальтон выдвинул идею о том, что в своей мельчайшей структурной форме эти элементы являются атомами. По сути, Дальтон признал, что химия занимается разделением атомарных элементов друг от друга и соединением их в различных комбинациях.

Это утверждение вызвало серьезные дебаты среди химиков на протяжении 1800-х годов. Хотя химики и говорили об элементах, не все

принимали идею о том, что их действительно нельзя разложить дальше. Сегодня трудно даже представить, как можно интерпретировать периодическую таблицу элементов без глубокого понимания атомной структуры, но даже ее создатель, Дмитрий Менделеев (1834–1907), выражал недоверие к идее о том, что атомы являются реальными физическими объектами, а не просто полезными математическими инструментами.



ЗАПОМНИ

В 1905 году некий немецкий физик с растрепанными волосами, работавший в швейцарском патентном бюро, сел писать свою докторскую диссертацию, в которой представил детальное объяснение хорошо известного, но не объясненного явления броуновского движения на основе атомной теории, как было рассказано в главе 3. Когда его предсказания получили экспериментальное подтверждение в 1908 году, атомная модель начала по-настоящему активно развиваться. Если вы еще не догадались, этим немецким физиком был Альберт Эйнштейн, который имел привычку серьезно относиться к полезным математическим идеям и делать великие открытия.

И электрон

Одним из последних доквантовых открытий, связанных с фундаментальной природой материи стало обнаружение электрона Дж. Дж. Томсоном (1856–1940) в 1897 году. Удивительно думать, что все открытия в области электричества на протяжении девятнадцатого века были сделаны, когда физики даже не могли обнаружить существование электронов.

СПЕКТРОСКОПИЯ: ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ С ПОМОЩЬЮ СВЕТА

Изучение света и материи начало пересекаться в середине девятнадцатого века с развитием спектроскопии – отрасли науки, связанной с исследованием спектра электромагнитного излучения, испускаемого веществом. Хотя физиков давно интересовали случаи, когда вещество начинало излучать свет, оптические инструменты стали достаточно совершенными только к середине девятнадцатого века, что позволило физикам подойти к изучению этого явления более систематически. Развитие инструментария в сочетании с более глубоким пониманием электромагнитного спектра, закодированным в уравнениях Максвелла, превратило спектроскопию в строгую область исследований.

Ключевую роль в связи этого с историей квантовой физики сыграли немецкие физики Роберт Бунзен (1811–1899) и Густав Кирхгоф (1824–1887). В 1860-х годах эти два физика начали публиковать работы, которые систематически устанавливали связь между определенными спектральными линиями излучения и элементами, испускающими эти линии. Говоря простым языком, если внимательно изучить свет, излучаемый при сжигании элемента, можно было определить, какой это элемент. Именно анализ этих спектров обеспечил значительную часть экспериментального прогресса в квантовой физике в следующем столетии, особенно в понимании структуры атома.

Спектроскопия подготовила почву не только для большей части квантовых исследований, о которых я рассказываю в главе 3, но и для преобразования нашего понимания ночного неба (да и дневного тоже). Менее чем через десятилетие супруги-астрономы Уильям и Маргарет Хаггинс применили методы спектроскопии за пределами лаборатории для изучения света, излучаемого звездами. Благодаря этому им удалось показать, что звезды состоят из тех же элементов, которые встречаются на Земле.

Однако физики уже выдвигали гипотезу о существовании электронов. Фактически, сам Бенджамин Франклин (1706–1790) предложил идею о том, что заряженные частицы перемещаются внутри электрических приборов. Вы, возможно, слышали историю о мистере Франклине и воздушном змее, которая демонстрирует, насколько сильно его интересовала эта тема.

До открытия Томсона Джордж Джонстон Стоуни в 1891 году использовал термин «электрон» для описания единицы заряда в экспериментах по пропусканию электрического тока через химические вещества. Однако технология, позволяющая фактически обнаружить эти заряженные частицы, не существовала до конца девятнадцатого

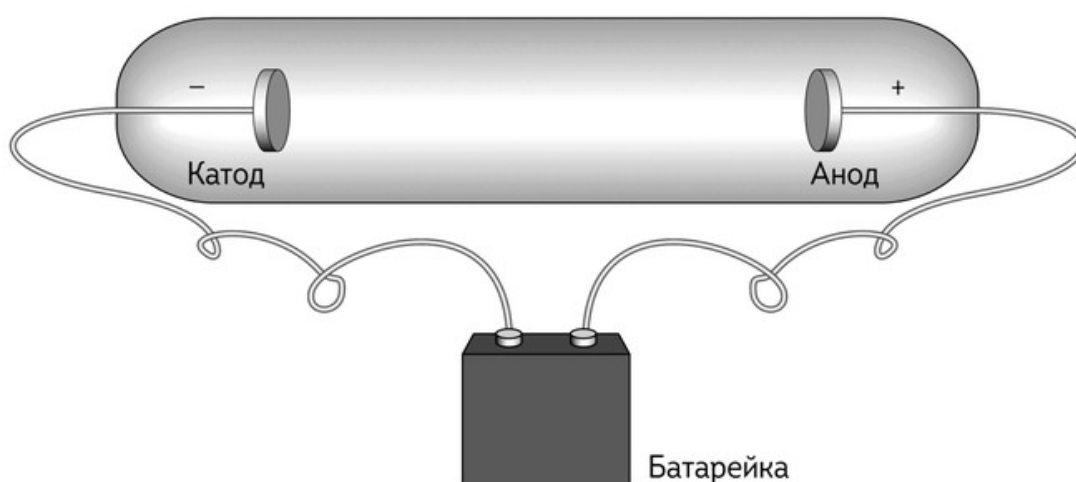


РИСУНОК 2-10:

Электронно-лучевые трубки позволяют изучать заряженные частицы в вакууме.

века, когда была изобретена электронно-лучевая трубка, показанная на рисунке 2-10.

Внутри трубки, показанной на рисунке, — вакуум, то есть из нее выкачан воздух. На каждом конце находится металлическая пластина, и эти пластины подключены к двум полюсам батареи. Металлическая пластина с положительным зарядом называется «анод». Металлическая пластина с отрицательным зарядом называется «катод» (и дает устройству его название).

Когда подключается и включается питание, трубка начинает светиться. Работа Томсона показала, что видимый луч был результатом потока отрицательно заряженных частиц через трубку. Томсон также предположил, что эти частицы были частью атомов, которые каким-то образом высвобождались из тока, протекающего через устройство.

Таким образом, физики открыли электрон — более легкую частицу, которая может быть выбита из атома, — за годы до того, как они вообще достоверно подтвердили существование атомов, не говоря уже об их внутренней структуре. Выяснение взаимосвязи электрона с остальной атомной структурой станет одним из величайших ранних достижений молодой квантовой теории.

Термодинамика: еще одна горячая тема

Одним из результатов промышленной революции стало растущее количество исследований по преобразованию энергии в полезную работу и, в частности, того, как эта энергия может эффективно производиться и передаваться туда, где она необходима. Основной формой энергии во время промышленной революции было тепло, а изучение того, как тепло связано с другими формами энергии, называется *термодинамикой*.

Ранее в этой главе (в разделе «Объекты в движении: классическая механика») я обсуждаю энергию в механике как сосредоточенную на движении конкретного объекта.

В области термодинамики вас не интересует движение конкретных частиц или объектов, вместо этого вы имеете дело с внутренним состоянием объекта или системы в целом. Сейчас ученые знают, что внутреннее состояние теплоты или температуры вызвано колебанием частиц внутри системы, но (как я упоминал в предыдущем разделе) химики и физики даже не знали о существовании атомов, когда разрабатывали область термодинамики!

К 1860-м годам ученые разработали два основных закона *термодинамики*, которые определяли их представления о ней. А когда изуче-

ние атома продвинулось вперед (после открытия квантовой физики), появился третий закон:

- » Первый закон: Количество теплоты, сообщённое системе, тратится на изменение её внутренней энергии и совершение ею механической работы.
- » Второй закон: В изолированной системе энтропия либо остаётся неизменной, либо возрастает в неравновесных процессах.
- » Третий закон: Энтропия системы при абсолютном нуле (температуры) является четко определенной константой.

Изучение эффективных тепловых систем в конечном итоге привело к тому, что правительство Германии объявило конкурс среди исследователей для создания таблицы термодинамических значений для так называемого абсолютно черного тела. В главе 3 вы узнаете, как немецкий физик решил проблему излучения абсолютно черного тела и запустил первую, центральную идею квантовой физики. (Нет, его звали не Альберт Эйнштейн. Это был Макс Планк. Да ладно... нельзя же ожидать, что Эйнштейн сделает все!)

Игры, в которые играют люди: Неизвестные и неопределенности

Классическая физика строила свое видение мира на идее, что в конечном счете все было очень хорошо определено. Если вы знали все силы, действующие на все частицы, то могли рассчитать результат любого набора взаимодействий. Второй закон термодинамики (упомянутый в предыдущем разделе) установил верхний предел возможности знать все силы и частицы, поскольку в любом спонтанном процессе возникает некоторый беспорядок. Вы никогда не сможете идеально предсказать каждый результат. Но в целом классический мир все еще оставался строго детерминированным — по крайней мере, в теории.

Однако даже в полностью детерминированной вселенной практически невозможно определить множество вещей. Математика дает способы справиться с неопределенностью, которая проявляется в науке еще до появления квантовой физики.

Бросок костей: Классическая вероятность

Классическим примером случайного события с четко определенными исходами является бросок игральной кости. Теоретически, если бы вы знали точную силу, скорость и углы, под которыми была брошена кость,

а также знали, от каких поверхностей она будет отскакивать, расчет результата броска был бы возможен. Для читателей, которые (как и я) являются поклонниками разнообразных настольных игр, использующих кости разной формы, позвольте уточнить, что здесь я говорю об обычной шестигранной кости — кубике с пронумерованными от 1 до 6 гранями, который игроки в «Подземелья и драконы» называют «d6».

Вычисление вероятности исхода для одной кости

Однако на бросок шестигранной кости влияет так много факторов, что вы действительно не можете получить достаточно информации для точного предсказания результата. Определение вероятности конкретного исхода означает вычисление числового описания того, насколько вероятно наступление события. В случае броска одного кубика, если я хочу узнать вероятность выпадения единицы, мне сначала нужно определить *пространство элементарных событий* — набор всех возможных исходов. Для одного броска кубика это пространство состоит из шести числовых значений от 1 до 6. Математически его можно записать как множество $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Только одно из этих значений соответствует интересующему меня исходу — единице, поэтому итоговая вероятность равна 1 из 6, или $1/6$.



ЗАПОМНИ

Вероятность — это дробное представление того, как часто при заданном количестве попыток можно ожидать получения предполагаемого результата. Минимально возможное значение — 0 (нет шансов), а максимально возможное — 1 (точно выпадет).

Рассмотрим два примера, касающихся выпадения определенного значения на одном кубике:

- » **Какова вероятность выбросить 7?** Ответ: вероятность равна 0. Выбросить 7 на шестигранном кубике невозможно.
- » **Какова вероятность выбросить число меньше 7?** Ответ: вероятность равна 1. Любой бросок шестигранного кубика гарантированно удовлетворяет этому критерию.

Как вероятности упрощают анализ



ТЕХНИЧЕСКИЕ
ДЕТАЛИ

Бросок одного кубика — это тривиальный пример, но представление пространства элементарных событий и вероятности исходов быстро усложняется для более сложных систем. Рассмотрим бросок двух кубиков. Теперь пространство элементарных событий намного сложнее. На первом кубике возможны 6 значений, и на втором кубике тоже 6 значений, а это означает, что всего в пространстве элементарных событий 36 элементов, представляющих возможные значения на двух кубиках, что полностью показано здесь:

$$\left\{ \begin{array}{cccccc} (1,1) & (2,1) & (3,1) & (4,1) & (5,1) & (6,1) \\ (1,2) & (2,2) & (3,2) & (4,2) & (5,2) & (6,2) \\ (1,3) & (2,3) & (3,3) & (4,3) & (5,3) & (6,3) \\ (1,4) & (2,4) & (3,4) & (4,4) & (5,4) & (6,4) \\ (1,5) & (2,5) & (3,5) & (4,5) & (5,5) & (6,5) \\ (1,6) & (2,6) & (3,6) & (4,6) & (5,6) & (6,6) \end{array} \right\}$$

Если вы пытаетесь определить вероятность выпадения единицы на обоих кубиках, то единственный элемент, соответствующий этому исходу — это (1,1). Это один элемент из 36, поэтому вероятность равна 1 из 36, или $1/36$.

Но предположим, что вы пытаетесь найти вероятность выпадения суммы ровно 7 на обоих кубиках. В этом случае комбинации (1,6), (2,5), (3,4), (4,3), (5,2) и (6,1) все подходят, поэтому вероятность выбросить сумму 7 равна 6 из 36, или $6/36$, что сокращается до $1/6$. Это самая распространенная сумма при броске двух кубиков.



ПОДСКАЗКА

Смысл работы с классическими вероятностями в том, что гораздо проще оперировать дробью $1/6$, чем каждый раз обращаться к полному пространству элементарных событий и анализировать все 36 элементов при изучении ситуации. Вы сжимаете подробную информацию о пространстве элементарных событий до вероятности. После этого можно двигаться дальше, работая с вероятностями. В квантовой физике, как вы узнаете в главе 3, вероятность приобретает принципиально иное значение, но сохраняет это преимущество сжатия информации.

Неопределенности и отклонения

В предыдущем разделе я говорил о вероятности в случае, когда результат является вполне определенным исходом (бросок кубика). Если кубик хорошо сделан, никакой неоднозначности в результате нет. Я могу просто прочесть значение на верхней грани шестигранного кубика. У меня есть неопределенность относительно того, каким будет фактическое значение до броска кубика, но абсолютно нет неопределенности в измерении после того, как кубик брошен.



ЗАПОМНИ

К сожалению, в науке такая определенность результата (как в случае с броском кубика) не всегда имеет место. Вероятности и неопределенности играют центральную роль в квантовой физике. Более века экспериментальных результатов подтверждают, что вероятностные расчеты квантовой физики работают, даже способами, которые могут казаться противоречащими интуиции. Фундаментальная неопределенность лежит в основе одного из ключевых принципов квантовой физики. (Подробнее об этом принципе читайте в главе 3.)

Учет погрешностей измерений

Недостаточная точность и различия в восприятии людей являются потенциальными источниками неопределенности в экспериментальных измерениях. К счастью, физика научилась учитывать эти неопределенности. Когда физик записывает результат измерения, он фиксирует не только значение, но и отслеживает точность этого измерения. Физик может измерять с точностью до десятой доли метра и сказать, что расстояние составляет 1,2 метра. Но он не знает, было ли измерение фактически 1,22 метра или 1,23 метра, потому что измерение не было настолько точным (до сотых). Любые последующие вычисления имеют ограниченную точность, основанную на этом измерении в 1,2 метра. Если физик хочет получить более точные результаты в конце, он должен делать чрезвычайно точные измерения на каждом этапе процесса.

Даже в очень хорошо определенном эксперименте не следует ожидать, что два случая одного и того же эксперимента дадут абсолютно одинаковый результат. По этой причине физики обычно стараются провести несколько повторений своего эксперимента, либо одновременно, либо последовательно, чтобы получить серию результатов. Каждый результат, конечно, имеет свой уровень достоверности, основанный на проведенных измерениях.



ЗАПОМНИ

Вы можете взять среднее значение измерений, но среднее само по себе не так полезно, поскольку вам необходимо как-то учесть разброс, который вы наблюдали в этих экспериментах.

Применение статистических понятий

Статистические понятия *дисперсии* и *среднеквадратического отклонения* помогают физикам учитывать различия в результатах экспериментов. Дисперсия σ^2 вычисляется как среднее значение квадрата разброса каждого измерения. Квадратный корень из дисперсии, σ , является среднеквадратическим отклонением. По различным причинам (известным статистикам) среднеквадратическое отклонение гораздо чаще используется, чем дисперсия, в качестве меры разброса данных.

Для переменной результата, вероятность которого известна, найти дисперсию относительно просто. Вы знаете вероятность каждого возможного исхода, поэтому можете определить вероятность конкретного разброса и использовать ее для расчета дисперсии по всем возможным исходам.

Но для *случайной переменной* (переменной, вероятность разных значений которой изначально неизвестна) вычисление дисперсии стано-

вится несколько сложнее. Поскольку вероятность переменной неизвестна, вы не можете умножать на эту вероятность. Вам придется вычислять дисперсию на основе серии результатов. В этом случае для расчета дисперсии необходимо учитывать ожидаемое значение переменной. Ожидаемое значение неизвестной переменной X можно записать как $\langle X \rangle$. (Я объясняю эти обозначения в главе 7.)

Чтобы вычислить дисперсию такой неизвестной переменной X , нужно взять ожидаемое значение квадрата переменной, $\langle X^2 \rangle$, и вычесть квадрат ожидаемого значения, $\langle X \rangle^2$, что дает следующие уравнения для дисперсии (σ^2) и среднеквадратического отклонения (σ):

$$\sigma^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$$
$$\sigma = \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2}$$

- » Изучение истоков квантовой физики
- » Эксперименты с волнами и частицами, действующими подобно друг другу
- » Взгляд на эксперименты, которые определили квантовую физику
- » Принятие квантовой неопределенности и вероятности
- » Объяснение энергии и материи в квантовом мире

Глава 3

Квантовая революция

Истоки квантовой физики уходят корнями в трансформацию представлений физиков о частицах и волнах. Никто не искал эту трансформацию. Девятнадцатый век завершился тем, что многие физики были весьма уверены — поскольку они так много узнали об энергии и материи, а также об их взаимодействии за предыдущие столетия, — что им остается лишь уточнить объяснения нескольких существующих экспериментов.

Никто не осознавал, что эти объяснения — такие как эксперимент с двумя щелями и излучение абсолютно черного тела — приведут к фундаментальному изменению точки зрения физиков. На протяжении первой половины двадцатого века практически все, что, как считали ученые, они знали (о материи, энергии и их взаимодействии), обрело новую перспективу.

В этой главе я рассматриваю основные открытия, определившие квантовую физику — от ее истоков до революционных работ 1960-х годов. Я исследую первые эксперименты, которые раскрыли квантовую природу реальности, и рассказываю о том, как эти эксперименты привели к новому пониманию вероятности на квантовом уровне. В завершение я описываю, как новая квантовая теория преобразила физическое понимание энергии и материи.

Дискретность: Проблема чернотельного излучения

Первая ключевая идея, отличающая квантовую физику от классической — это квантование, или измерение величин дискретными, а не непрерывными единицами. Откуда впервые появилась эта идея? Это произошло не просто потому, что кому-то однажды пришла в голову такая мысль, и он решил построить вокруг нее целую научную область. Идея квантованных энергий возникла из одной из самых ранних проблем классической физики: проблемы излучения абсолютно черного тела.

Когда вы нагреваете объект, еще до того, как он начинает испускать видимый свет, он излучает свет в инфракрасном спектре (это невидимый свет с большей длиной волны и меньшей частотой, чем видимый). При достаточном нагреве электроны на поверхности объекта возбуждаются термически, и эти электроны, ускоряясь и замедляясь, излучают свет в видимом спектре. Именно этот эффект вы наблюдаете, когда видите, как светится горячий объект, например, нагретый металл.

Физика конца XIX — начала XX века была озабочена спектром света, излучаемого абсолютно черными телами. *Абсолютно черное тело* — это материал, который не только излучает энергию (в виде света) в соответствии со своей температурой, но и поглощает свет из окружающей среды. Физики любят решать сложные проблемы, рассматривая предельные случаи. Чтобы упростить задачу, они сосредоточились только на излучении света, а не на его поглощении. В 1859 году немецкий физик Густав Кирхгоф постулировал существование абсолютно черного тела, которое ничего не отражало и поглощало весь падающий на него свет (отсюда и термин «абсолютно черное тело», поскольку объект выглядел бы совершенно черным, поглощая весь падающий свет). Но при нагревании абсолютно черное тело начинает излучать в соответствии с повышением его температуры и испускать свет.



ЗАПОМНИ

Эта концепция абсолютно черного тела может показаться чисто абстрактной, но она имела определенное значение для развивающейся электроэнергетической промышленности. Немецкое правительство хотело установить формулу, которая показывала бы, как обычный спектр (интенсивность и частота) этого излучения меняется с температурой. Исторически этот эксперимент не был бы столь важным — если бы не тот факт, что его решение ввело в физику понятие кванта!

Что ж, было сложно создать физическое абсолютно черное тело — в конце концов, какой материал поглощает свет на 100 процентов



РИСУНОК 3-1:
Абсолютно черное тело.

и ничего не отражает? Но физики проявили изобретательность и придумали полость с отверстием, которую вы можете видеть на рисунке 3-1. Если вы посмотрите на это абсолютно черное тело где угодно, кроме отверстия, свет полностью поглощается, и вы не видите никакого отраженного излучения.

Если направить свет на отверстие, весь свет попадает внутрь, где многократно отражается от внутренних стенок полости — пока полностью не поглотится. (Ничтожно малое количество света выходит обратно через отверстие.) А если нагреть полость, отверстие начинает светиться, излучая световую энергию. Вот вам и довольно хорошая модель абсолютно черного тела.

Придя к этой идее, экспериментаторы попытались выяснить, что произойдет — то есть какой спектр света будет излучаться при нагревании абсолютно черного тела. На рисунке 3-2 показан спектр абсолютно черного тела (и попытки смоделировать этот спектр) для двух разных температур, T_1 и T_2 . Проблема заключалась в том, что никто не мог дать теоретическое объяснение спектру света, излучаемому абсолютно черным телом. Все решения (или объяснения), которые могла пред-

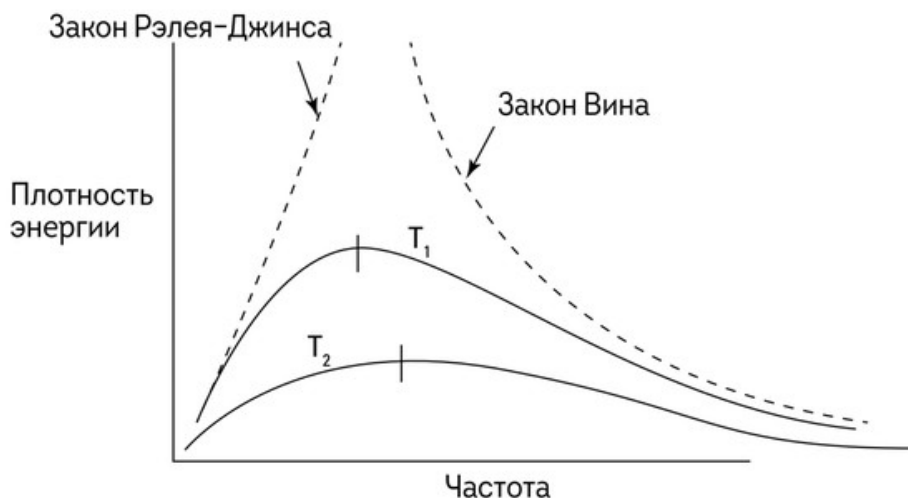


РИСУНОК 3-2:
Спектр излучения абсолютно черного тела.

ложить классическая физика, не соответствовали экспериментальным данным. Первая попытка, закон Вина, работала для высоких частот, но давала сбой на низких, а вторая попытка, закон Рэлея-Джинса, работала для очень низких частот, но не справлялась с высокими. Исследователям требовался новый подход!

Интуитивный (квантовый) скачок: спектр Макса Планка

Проблема излучения абсолютно черного тела оказалась сложной для решения, и вместе с ней появились зачатки квантовой физики. Революционное озарение пришло к немецкому физiku Максy Планку, который как нельзя лучше подходил для ее решения. Одним из его наставников был Густав Кирхгоф — тот самый ученый, который впервые поставил вопрос об абсолютно черном теле. Когда университету потребовалось найти замену Кирхгофу, они предложили эту должность Максy Планку!

Вот каким было радикальное предположение Планка: что, если количество энергии, которой световая волна может обмениваться с веществом, не является непрерывным, как в классической физике, а дискретным? Другими словами, Планк предположил, что энергия света, излучаемого стенками полости абсолютно черного тела, может принимать только целочисленные значения, как показано в следующем уравнении, где h — универсальная постоянная:

$$E = nh\nu, \text{ где } n = 0, 1, 2, \dots$$

Используя эту теорию, какой бы безумной она ни казалась в начале 1900-х годов, Планк преобразовал непрерывные интегралы, используемые Рэлеем-Джинсом, в дискретные суммы бесконечного числа слагаемых. Это простое изменение привело Планка к следующему уравнению для спектра излучения абсолютно черного тела:

$$u(\nu, T) = \frac{2\pi h\nu^5}{c^3 (e^{h\nu/kT} - 1)}$$

Вот составляющие этого уравнения:

- » $u(\nu, T)$: Распределение интенсивности спектра света на частоте ν для абсолютно черного тела при температуре T
- » ν : Частота излучения абсолютно черного тела
- » T : Температура абсолютно черного тела в Кельвинах
- » c : Скорость света, $2,998 \times 10^8$ м/с

- » k : Постоянная Больцмана, равная $1,3807 \times 10^{-23}$ Дж·К⁻¹
- » h : Постоянная Планка, новая константа со значением $6,626 \times 10^{-34}$ Дж·с

Уравнение Планка оказалось верным — оно в точности описывает спектр абсолютно черного тела как на низких, так и на высоких (и, кстати, на средних) частотах.

Эта идея была совершенно новой. Планк утверждал, что излучающие осцилляторы (механизмы, испускающие энергию) в абсолютно черном теле не могли обладать произвольными уровнями энергии, как это допускала классическая физика; они могли принимать только определенные, квантованные значения энергии. Более того, Планк предположил, что это справедливо для любого осциллятора — его энергия должна быть целым кратным произведения $h\nu$ (универсальной постоянной) на частоту.



ЗАПОМНИ

Так уравнение Планка стало известно как правило квантования Планка, а h получила название постоянной Планка. Утверждение о том, что энергия всех осцилляторов квантуется, ознаменовало рождение квантовой физики.

Подход Планка не был очевиден, поскольку классическая физика допускала непрерывный спектр значений энергии. Планк применил математический прием, который соответствовал экспериментальным данным, но сам считал это лишь удачной находкой. Он не делал революционных заявлений об устройстве света или энергии. Он не предложил физического объяснения того, почему осцилляторы могут принимать только дискретные значения энергии. Хотя потребовались годы, чтобы кто-либо осознал последствия решения Планка, неожиданная революция началась — и остановить ее было уже невозможно.

КВАНТОВЫЕ НОБЕЛЕВСКИЕ ПРЕМИИ

Ключевые открытия в квантовой физике привели к лавине Нобелевских премий по физике. Этот список не является исчерпывающим, но содержит некоторые важнейшие открытия и идеи, отмеченные Нобелевскими премиями. В частности, сюда в основном не включены премии, связанные с ядерной физикой, а не с самой квантовой теорией (хотя ядерная физика невозможна без квантовой теории).

- 1918 – Макс Планк, за открытие квантов
- 1921 – Альберт Эйнштейн, за объяснение фотоэлектрического эффекта с помощью квантованного света (фотонов)

- 1922 – Нильс Бор, за использование квантовой теории для объяснения структуры атома
- 1923 – Роберт Эндрюс Милликен, за экспериментальное подтверждение заряда электрона и фотоэлектрического эффекта
- 1926 – Жан Перрен, за экспериментальное подтверждение существования атомов
- 1929 – Луи де Бройль, за открытие волновой природы электронов
- 1932 – Вернер Карл Гейзенберг, за создание квантовой механики
- 1933 – Эрвин Шрёдингер и Поль Дирак, за разработку и развитие математических подходов в квантовой механике
- 1945 – Вольфганг Паули, за установление принципа запрета Паули, определяющего поведение электронов
- 1954 – Макс Борн, за установление соответствия между волновыми функциями и вероятностями
- 1965 – Синъитиро Томонага, Джулиан Швингер и Ричард Фейнман, за развитие квантовой электродинамики (квантовая теория электромагнетизма)
- 1969 – Мюррей Гелл-Манн, за открытие квантовой теории фундаментальных частиц и их взаимодействий (квантовая хромодинамика)

Видя свет как частицы

Свет как частицы? Разве свет не состоит из волн? Фундаментальная природа света долгое время была предметом споров в предыдущие столетия, поскольку экспериментальные данные подтверждали обе идеи. Но к концу восемнадцатого века физики в основном согласились, что волновая интерпретация света лучше соответствует большинству данных, как я обсуждаю в главе 2. Однако реальность преподнесла им сюрприз, показав, что свет проявляет свойства как частиц, так и волн.

РЕШЕНИЕ ЗАГАДКИ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

Фотоэлектрический эффект был еще одним из тех экспериментальных результатов, которые спровоцировали кризис в классической физике на рубеже двадцатого века. Объяснение этого эффекта также стало одним из первых успехов Эйнштейна и предоставило доказательство квантования света. Вот что произошло.

Когда вы направляете свет на металл, происходит эмиссия электронов, как показано на рисунке 3-3. Электроны в металле поглощают падающий свет, и если они получают достаточно энергии, то могут вырваться с поверхности металла. Согласно классической физике, свет — это просто волна, которая может обмениваться с металлом любым количеством энергии. Когда вы направляете свет на кусок металла, электроны в металле должны поглощать свет и постепенно накапливать достаточно энергии для эмиссии из металла. Предполагалось, что при увеличении интенсивности света (то есть общей энергии), падающего на металл, электроны должны вылетать с большей кинетической энергией. А очень слабый свет вообще не должен был вызывать эмиссию электронов, разве что после нескольких часов облучения.



ЗАПОМНИ

Но в ранних экспериментах по фотоэффекту все происходило иначе. Электроны не подчинялись представлениям классической физики. Вместо этого они вылетали из металла, как только на него падал свет. Более того, независимо от того, насколько слабым был падающий свет (а исследователи проводили эксперименты с настолько слабым светом, что ожидали увидеть эмиссию электронов только через несколько часов), электроны выпускались мгновенно.

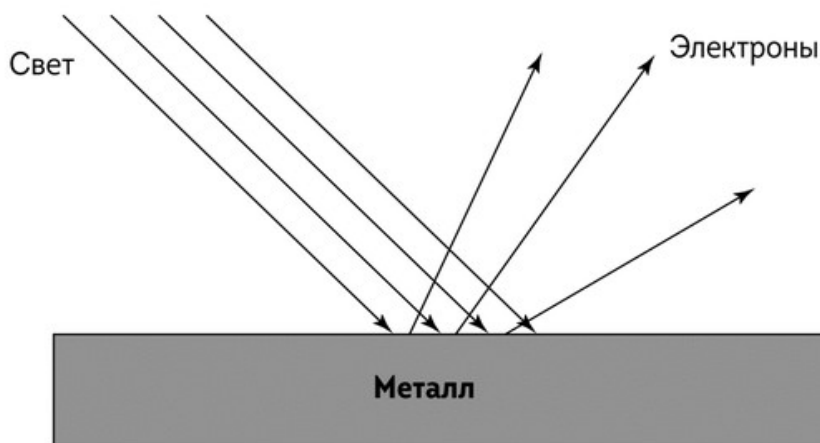


РИСУНОК 3-3.
Фотоэлектрический эффект.

Эксперименты с фотоэлектрическим эффектом показали, что кинетическая энергия K испущенных электронов зависела только от частоты падающего света, а не от его интенсивности, как показано на рисунке 3-4.

На рисунке 3-4 ν_0 называется пороговой частотой. Если освещать металл светом с частотой ниже этого порога, электроны не выпускаются. Испускаемые электроны происходят из пула свободных электронов в металле (во всех металлах есть пул свободных электронов), и чтобы высвободить эти электроны с поверхности металла, необходимо сообщить им энергию, эквивалентную работе выхода металла W . Другими

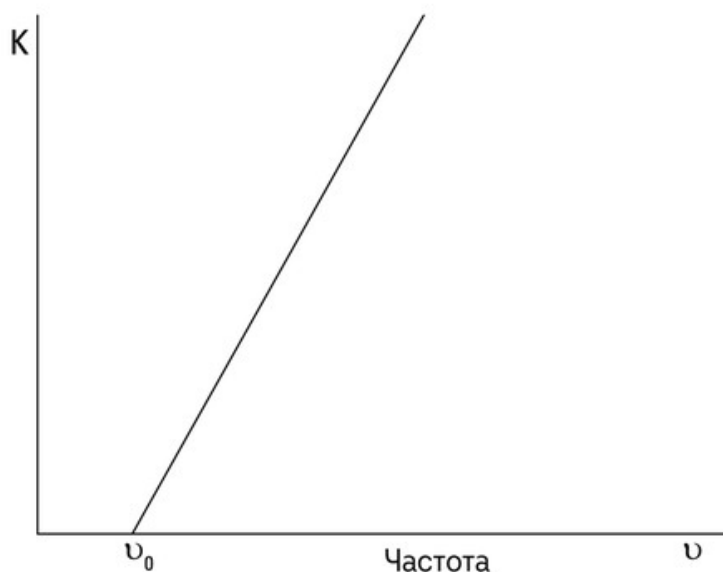


РИСУНОК 3-4:

Зависимость кинетической энергии испущенных электронов от частоты падающего света.

словами, работа выхода — это минимальная энергия, необходимая для высвобождения свободных электронов из металла.

Результаты было трудно объяснить с классической точки зрения, и тут на сцену выходит Эйнштейн в начале своего расцвета, около 1905 года. Вдохновленный успехом Планка (см. раздел «Интуитивный [квантовый] скачок: спектр Макса Планка» ранее в этой главе), Эйнштейн постулировал, что квантованы не только осцилляторы, но и свет — на дискретные единицы, называемые *фотонами*. (Сам он их так не называл. Термин «фотоны» появился примерно через десять лет, и потребовалось еще около десятилетия, чтобы он получил широкое признание.) Свет, предположил он, ведет себя и как частицы, и как волны.

Согласно этой схеме, когда свет падает на металлическую поверхность, фотоны сталкиваются со свободными электронами, и электрон полностью поглощает каждый фотон. Затем Эйнштейн применил постоянную Планка для расчета энергии фотона $h\nu$. Когда эта энергия становится больше работы выхода металла (энергии при пороговой частоте ν_0), электрон испускается. Переменная K представляет кинетическую энергию испущенного электрона, что дает следующее уравнение, которое можно решить относительно K :

$$h\nu = W + K \Rightarrow K = h\nu - W \Rightarrow K = h\nu - h\nu_0 \Rightarrow K = h(\nu - \nu_0)$$

Поскольку пороговая частота для объекта не меняется, а постоянная Планка, как следует из названия, постоянна, это показывает, что кинетическая энергия освобожденных электронов полностью зависит от частоты света. И действительно, этот подход соответствует экспериментальным данным!



Эйнштейн показал, что свет — это не просто волна, но его также можно рассматривать как частицу, фотон. Другими словами, свет квантован. Это было важное открытие — настолько важное, что именно оно было особо отмечено, когда Эйнштейну присудили Нобелевскую премию в 1921 году. (Многие все еще считали его знаменитую теорию относительности несколько спорной в то время.) В 1905 году объяснение света как частиц было также весьма неожиданной работой Эйнштейна, хотя и основанной на более ранних трудах Планка. Свет квантуется? Свет приходит дискретными порциями энергии? Что дальше?

РАСШИРЯЯ КВАНТОВОЕ СЛОВО

В годы, последовавшие за 1905 годом, Эйнштейн был не единственным, кто столкнулся с необходимостью использовать квант в своих объяснениях. Теперь, когда физики знали, как его искать, они повсюду находили кратные $h\nu$. Ничто в микроскопическом мире не казалось непрерывным, все было квантовым по своей природе, и это уже нельзя было игнорировать!

В 1911 году бельгийский промышленник Эрнест Солвей спонсировал конференцию, на которую в Брюссель съехалась группа из 21 ведущего европейского ученого, чтобы обсудить этот вопрос. Среди них был Макс Планк, который заявил (о квантах), что «за последние десять лет ничто в физике не стимулировало, не возбуждало и не раздражало меня так постоянно». Далее Планк заявил, что существующая парадигма классической физики «очевидно слишком узка, чтобы учесть все эти физические явления, которые недоступны непосредственно нашим грубым чувствам».

Слово о квантовой физике не только дошло до молодого Нильса Бора, который станет одним из ведущих теоретиков в области квантовой физики, но и перелетело через океан в Америку. Однако американские физики той эпохи были в основном экспериментаторами и не проявляли особого интереса к новой, запутанной квантовой теории. На самом деле, практически все теоретические открытия в области квантовой теории в первой трети двадцатого века были сделаны европейскими физиками.

Рассеяние света на электронах: Эффект Комптона

Для мира, который все еще с трудом воспринимал свет как частицы (см. предыдущий раздел), Артур Комптон (1892–1962) нанес последний удар, открыв эффект Комптона. Его эксперимент 1922 года включал рассеяние фотонов на электронах, как показано на рисунке 3-5.

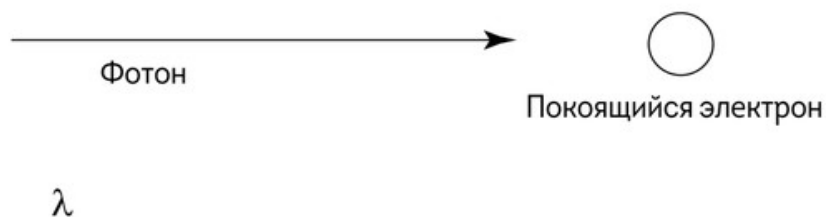


РИСУНОК 3-5.

Свет, падающий на покоящийся электрон.

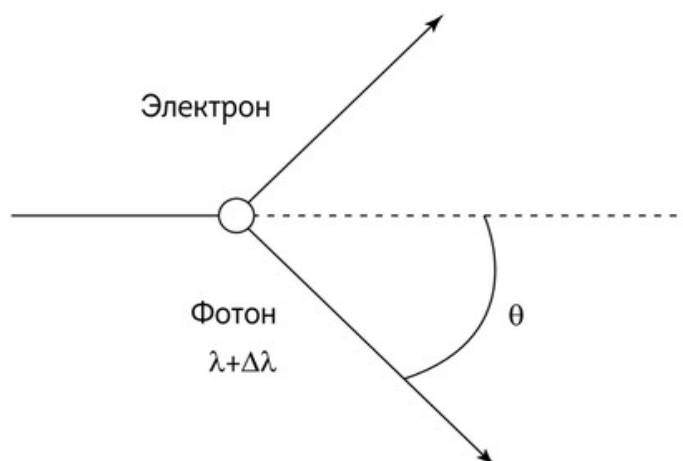


РИСУНОК 3-6.

Рассеяние фотона на электроне.

Падающий свет (любой свет, попадающий на объект) приходит с длиной волны λ и попадает на покоящийся электрон. После этого происходит рассеяние света, как показано на рисунке 3-6.

Согласно классической теории, должно было произойти следующее: электрон должен был поглотить падающий свет, совершить колебания и излучить его — с той же длиной волны, но с интенсивностью, зависящей от интенсивности падающего света. Но произошло не это — фактически, длина волны света изменилась на $\Delta\lambda$, что называется сдвигом длины волны. Рассеянный свет имел длину волны $\lambda + \Delta\lambda$ — другими словами, его длина волны увеличилась, что означает потерю энергии светом. И $\Delta\lambda$ зависит от угла рассеяния θ , а не от интенсивности падающего света.



ЗАПОМНИ

Комптон мог объяснить результаты своего эксперимента, только сделав предположение, что он имеет дело с двумя частицами — фотоном и электроном. То есть он рассматривал свет как дискретную частицу, а не волну. И он предположил, что фотон и электрон сталкиваются упруго — то есть сохраняются как полная энергия, так и импульс.

Предполагая, что и свет, и электрон являются частицами, Комптон вывел следующую формулу для сдвига длины волны (это несложный расчет, если предположить, что свет представлен фотоном с энергией $E = h\nu$ и импульсом $p = E/c$):

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\theta)$$

где h — постоянная Планка, m_e — масса электрона, c — скорость света, а θ — угол рассеяния света. Если вы хотите попрактиковаться в тригонометрии, то можете заметить, что структура этого уравнения позволяет записать его и в других формах, например, используя синус вместо косинуса. Также вы можете встретить это уравнение в несколько иной форме, с использованием комптоновской длины волны электрона, λ_c , определяемой как $\lambda_c = h/m_e c$.

Помимо получения Нобелевской премии по физике 1927 года за эту работу, Комптон также начал использовать термин «фотон» для описания квантов света в 1926 году. Хотя он не был первым, кто это сделал, именно его принятие этой терминологии привело к ее широкому распространению среди физиков, и в итоге это название стало официальным обозначением световых частиц.

Чтобы вывести формулу для сдвига длины волны, Комптону пришлось сделать допущение, что в данном случае свет ведет себя как частица, а не как волна. Таким образом, именно корпускулярная природа света оказалась преобладающей.

Атомная модель Бора

Физики приняли идею атомов на протяжении девятнадцатого века, но у них все еще не было четкого представления о том, как устроены эти мельчайшие объекты. Электрон был открыт в 1897 году, и ученые рассуждали, что атом должен содержать положительный заряд. Но идея ядра, содержащего положительно заряженные частицы, еще не была широко принята.



ПОДСКАЗКА

Физик Эрнест Резерфорд (1871–1937) предположил, что электроны движутся вокруг центра атома по орбитам — подобно тому, как планеты движутся вокруг Солнца. Если вы когда-либо видели традиционное изображение атома с электронами, движущимися по таким орбитам, то перед вами модель атома Резерфорда.

Однако в этой модели существовали очевидные проблемы — в первую очередь то, что физики не могли понять, как электрон ускоренно двигался по орбите, а значит, согласно классической электродинамике, должен был излучать свет. Излучение крайне быстро истощало бы энергию электрона, из-за чего тот должен был бы падать на ядро за считанные мгновения.

Изменение электронных орбит

На сцену выходит молодой Нильс Бор, только что защитивший в 1911 году докторскую диссертацию, в которой показал, что классическая физика не справляется с объяснением электромагнитных свойств металлов. Он взялся за новую задачу, применив квантовую теорию для объяснения орбитального поведения электрона.

Позже Бор утверждал, что идея применить квантовую теорию не была его уникальным озарением. В конце концов, физики по всей Европе обсуждали новую квантовую теорию, и многие видные ученые считали, что она будет полезна для объяснения микроскопических свойств. Поэтому мысль о том, что квантовая теория может помочь разрешить проблему электронных орбит, была вполне естественной.

Вдохновение пришло к Бору благодаря спектральным линиям (о которых я упоминаю в главе 2). Спектральные линии представляют энергию, излучаемую при переходе электрона в атоме с одной орбиты на другую. Фактически, уравнение Иоганна Бальмера 1885 года выявило закономерность в длинах волн этих линий, связав их с целочисленными значениями.

Бор понял, что связь непрерывной величины, такой как длина волны, с целыми числами очень напоминает квантованное поведение. Используя уравнение Бальмера, он смог рассчитать, что происходит с электронами в атоме, включая следующие процессы:

- » Поглощение и испускание фотонов: Когда электрон в атоме сталкивается с фотоном, он поглощает энергию фотона, переходя на более высокую орбиту. Когда позже он опускается на более низкую орбиту, электрон испускает фотон (что и создает спектральные линии).
- » Подчинение орбитальным правилам: Поскольку энергия квантована (разрешены только определенные значения энергии), а энергия связана с орбитой, разрешены только определенные орбиты. Электрон должен мгновенно перемещаться с одной орбиты на другую, что указывает на еще одну прерывность, введенную квантовой теорией.

НАСЛЕДИЕ БОРА

В 1921 году Бор основал Институт теоретической физики при Копенгагенском университете. Часто называемый Копенгагенским институтом, он стал одним из самых влиятельных научных центров в Европе

(да и во всем мире) для обсуждения и исследования всех аспектов квантовой теории, включая совершенствование атомной физики. В 1965 году, через три года после смерти Бора и в день его 80-летия, Копенгагенский институт был переименован в Институт Нильса Бора.

В своем институте Бор стал активным сторонником изучения глубинного смысла квантовой теории, и он вновь оказал сильное влияние на интерпретации квантовой физики, обсуждаемые в главе 6 (и на критику этих интерпретаций). Даже сейчас наиболее распространенная интерпретация квантовой физики называется копенгагенской, поскольку именно ее наиболее активно отстаивали Бор и его Институт.



ПОДСКАЗКА

Переход электрона с одной орбиты на другую совсем не похож на перемещение спутника с одной орбиты вокруг Земли на другую. Переход спутника не происходит мгновенно. Спутник фактически движется через пространство между орбитами. Это категорически *не допускается* в модели Бора, которая работала бы, только если бы спутник телепортировался, прыгал или мгновенно перескакивал с одной орбиты на другую удаленную орбиту, не пересекая огромное пространство между орбитами. **Примечание:** «Огромное» здесь относительно крошечного размера электрона (или, метафорически, спутника).

Объяснение результатов с помощью модели Бора



ЗАПОМНИ

Какой бы странной ни была идея Бора, она имела то преимущество, что действительно объясняла поведение, наблюдаемое в простом атоме водорода. Применение этой концепции к более сложным атомным структурам требовало дополнительной работы, но со временем Бор и его коллеги показали, что этот подход работает для объяснения экспериментальных результатов. А в науке соответствие экспериментальным результатам может значительно способствовать признанию идеи — какой бы странной она ни была.

Двойственная природа: Взгляд на частицы как на волны

В 1923 году физик Луи де Бройль предположил, что не только световые волны проявляют свойства частиц, но верно и обратное — все материальные частицы должны демонстрировать волновые свойства.

Как работает эта двойственная природа? Для фотона импульс $p = h\nu / c = h/\lambda$, где ν — частота фотона, а λ — его длина волны. Де Бройль определил вектор, представляющий волну, называемый волновым вектором, таким образом, что его модуль $k = p/\hbar$, где $\hbar = h/2\pi$. Де Бройль утверждал, что такое же соотношение должно выполняться для всех материальных частиц. То есть,

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

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

Де Бройль представил эти, казалось бы, удивительные предположения в своей докторской диссертации. Чтобы проверить их, исследователи обратились к классическому эксперименту, проведенному со светом: эксперименту с двумя щелями. Этот эксперимент фактически предоставил одно из самых убедительных доказательств того, что свет ведет себя как волна (как обсуждалось в главе 2). На рисунке 3-7 вы можете видеть установку и результаты для этого нового квантового варианта, где вместо светового пучка используется пучок электронов. В этом случае экран заменен пленкой, которая меняет цвет при попадании электрона, позволяя измерять интенсивность электронов, попадающих в любую часть экрана.

Если у вас одна щель, электронный пучок делает именно то, что вы ожидаете: он попадает в экран с другой стороны щели. Это можно увидеть на рисунке 3-7 (а и b).

Интересные явления начинают происходить только при наличии двух отдельных щелей (как показано на рисунке 3-7c). Можно было бы ожидать, что результат будет представлять собой простую сумму картин от каждой отдельной щели, но это не так. Вместо этого электронный пучок создает интерференционную картину из чередующихся ярких и темных полос, что указывает на перекрытие, подобное перекрытию двух световых волн. Таким образом, эксперимент убедительно подтверждает, что электронный пучок демонстрирует волновое

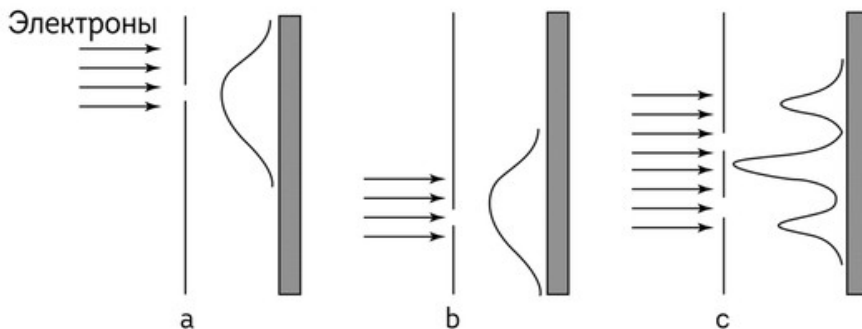


РИСУНОК 3-7:
Электронный пучок, проходящий через две щели.

поведение, совершенно не соответствующее тому, как должны вести себя частицы. Эти частицы проявили в точности такое же волновое поведение, какое наблюдалось у света!

Результат подтвердил концепцию де Бройля о волнах материи. Эксперимент подтвердил соотношение $\lambda = h/p$, и де Бройль оказался прав. Присвойте этому человеку докторскую степень!



ЗАПОМНИ

Эта двойственная природа материи, вероятно, является одной из самых контринтуитивных и сложных для понимания концепций во всей квантовой физике. В классической физике частицы остаются частицами, а волны — волнами, и различие между ними очевидно. Открытия Эйнштейна, Комптона, Дирака и де Бройля, описанные в этой главе, разрушили это простое разделение в эпоху квантовой физики. То, ведет ли себя объект как отдельная частица или как волна, во многом зависит от того, как ученый решает на него посмотреть. Эта особенность квантовой физики называется *корпускулярно-волновым дуализмом*. На протяжении всей книги я часто говорю о материи в терминах волн — так что привыкайте к этому.

Позитрон? Дирак и образование пар

В 1928 году физик Поль Дирак предсказал существование положительно заряженного анти-электрона — позитрона. Он сделал это, выведя квантовую физику на новый уровень, объединив теорию относительности с квантовой механикой (которая занимается математическим описанием движения и взаимодействия субатомных частиц) и создав релятивистскую квантовую механику. Однако когда он это сделал, полученное им уравнение дало неожиданный и странный результат: частицу, которая выглядела в точности как электрон, но имела положительный электрический заряд.

Уравнение сделало смелое предсказание: античастицу электрона! И всего четыре года спустя физики действительно обнаружили позитрон.

В те времена, до появления ускорителей частиц, физики полагались на космические лучи — частицы, которые попадают на Землю из космоса — как на их источник. Для наблюдения следов таких частиц они использовали камеры Вильсона, заполненные паром от сухого льда. Камеры помещали в магнитные поля, чтобы измерять импульс частиц по их искривленным траекториям в этих полях.

В 1932 году физик заметил удивительное событие, произошедшее в камере Вильсона. Пара частиц с противоположными зарядами (что можно было определить по характеру их искривления в магнитном поле) появилась буквально из ниоткуда. *К точке возникновения этих*

двух частиц не вел никакой след. Появление этих частиц из ниоткуда назвали рождением пар — превращением высокоэнергетического фотона в электрон и позитрон, которое может происходить, когда фотон пролетает вблизи тяжелого атомного ядра.

Таким образом, экспериментально физики теперь наблюдали превращение фотона в пару частиц, что служило дополнительным доказательством корпускулярной природы света. Позже исследователи также наблюдали аннигиляцию пар: превращение электрона и позитрона в чистый свет.

Оказалось, что рождение и аннигиляция пар подчиняются недавно предложенной Эйнштейном теории относительности — в частности, его самой знаменитой формуле $E = mc^2$, которая определяет чистый энергетический эквивалент массы.

Невозможно знать все (Но можно выяснить?..)

Вероятность всегда является мерой неопределенности, как обсуждалось в главе 2. В квантовой физике, как показывают различные эксперименты, даже неясно, являются ли волна и частица разными сущностями! Квантовая механика вполне комфортно существует с такой неопределенной картиной. Эта точка зрения возмущала многих выдающихся физиков того времени — особенно Альберта Эйнштейна, который знаменито заявил: «Бог не играет в кости».

Это мнение особенно иронично, поскольку в 1916 году Эйнштейн написал одну из первых работ, применяющих вероятность в квантовом контексте. В этой статье он использовал вероятность для интерпретации атомных переходов в боровской модели атома водорода. (См. раздел «Атомная модель Бора» ранее в этой главе.) Но годы спустя Эйнштейн возражал против полного масштаба того, как вероятность проявлялась в квантовом мире.

В этом разделе я обсуждаю идею неопределенности и то, как квантовые физики работают с вероятностями.

Положение и импульс: принцип неопределенности Гейзенберга

Волновые свойства материи порождают дополнительные сложности — волны не локализованы в пространстве, поэтому границы, которые в классической физике считались четкими и определенными, перестают быть таковыми в квантовом мире. Именно это понимание

вдохновило Вернера Гейзенберга в 1927 году сформулировать свой знаменитый принцип неопределенности.



ЗАПОМНИ

В классической физике объекты можно полностью описать через их импульс и положение, причем оба параметра можно измерить точно (в пределах погрешности измерительных приборов). Другими словами, классическая физика полностью детерминистична.

Понимание неопределенности при измерениях

Однако на атомном уровне квантовая физика рисует совершенно иную картину. Гейзенберг осознал, что чем точнее вы пытаетесь измерить положение объекта, тем менее точно вы можете измерить его импульс (или скорость). И наоборот.



ПОДСКАЗКА

Рассмотрим такую аналогию для измерения положения и импульса: если гоночный автомобиль мчится по трассе, вы можете сосредоточиться либо на измерении момента, когда он пересекает определенную точку трассы (положение), либо на измерении времени, за которое он проходит определенное расстояние (его импульс или скорость). Однако чем больше внимания вы уделяете одному из этих измерений, тем меньше внимания сможете уделить другому.

Но неопределенность в квантовой физике возникает не просто из-за того, что у ученых нет достаточной концентрации или инструментов для точных измерений. Этот момент действительно нельзя переоценить. Причина неопределенности в квантовой физике кроется в корпускулярно-волновом дуализме. Волну невозможно измерить так же точно, как характеристики мчащегося автомобиля. Ее нельзя зафиксировать, каким бы совершенным ни был измерительный прибор.

Количественное описание неопределенности

Принцип неопределенности Гейзенберга утверждает, что между положением и импульсом существует неустранимая неопределенность, причем не в каком-то расплывчатом смысле. Неопределенность точно описывает эту взаимосвязь. Гейзенберг математически обосновал свое утверждение, которое впоследствии подтвердилось экспериментально. (В главе 7 я показываю шаги вывода принципа неопределенности Гейзенберга.) Если Δx — это неопределенность измерения положения частицы по координате x , а Δp_x — неопределенность измерения ее импульса в направлении координатной оси x , то, используя новую константу $\hbar = h/2\pi$ (обычно называемую «аш с чертой» или приведенной постоянной Планка), он получил следующую формулу:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Заметьте, что две неопределенности (Δx и Δp_x) перемножаются, и их произведение должно быть больше некоторой константы (хотя, справедливости ради, очень маленькой). Если вы проводите измерения этих двух характеристик с максимально возможной точностью и хотите уменьшить одну из неопределенностей вдвое, то сможете сделать это, только удвоив неопределенность другой величины. Чем-то придется пожертвовать.



ЗАПОМНИ

В отличие от классической физики, квантовая физика полностью индетерминистична. Вы никогда не сможете точно знать одновременно и положение, и импульс частицы. Вы можете указать только вероятности для этих связанных измерений.

Применение принципа неопределенности в физике частиц

Еще один вариант принципа неопределенности Гейзенберга применяется в физике частиц и особенно полезен при рассмотрении частиц, распадающихся за определенное время жизни. Это уравнение имеет вид:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

где ΔE — неопределенность в измерении энергии, Δt представляет неопределенность времени жизни частицы, а $\hbar$ — приведенная постоянная Планка, описанная ранее в этом разделе.

Это уравнение возникает во многих случаях в квантовой физике. Рассмотрим распространенный пример: когда атомы переходят из возбужденных состояний, они испускают свет, образующий спектры излучения. При наблюдении атомных спектров излучения этих атомов обнаруживается серия спектральных линий, которые связаны с энергетическими состояниями перехода. Линия всегда представляет собой распределение излучения в некотором диапазоне частот, отражающее разброс энергии при изменении состояния.

Энергетически-временная версия принципа неопределенности говорит, что произведение неопределенности энергии на неопределенность времени должно быть больше половины приведенной постоянной Планка. Если возможный разброс времени Δt очень мала (возбужденное состояние очень короткоживущее), то ΔE будет больше (спектральные линии шире). И, следуя той же логике, возбужденные состояния, существующие более длительное время (большее Δt), будут иметь более узкие спектральные линии (меньшее ΔE).

Квантовые кости: новый взгляд на вероятность

В квантовой физике состояние частицы описывается волновой функцией $\psi(r, t)$. Волновая функция описывает волну де Бройля частицы, задавая ее амплитуду как функцию положения и времени. (Подробнее о де Бройле см. в предыдущем разделе «Двойственная природа: рассмотрение частиц как волн».)



ЗАПОМНИ

Волновая функция дает амплитуду частицы, а не интенсивность; чтобы найти интенсивность волновой функции, нужно возвести ее в квадрат: $|\psi(r, t)|^2$. Интенсивность волны — это характеристика, равная вероятности того, что частица будет находиться в данном положении в данный момент времени.

Два подхода к вероятностям исходов

Прозрение в отношении интерпретации волновой функции принадлежит Макс Борну, который был наставником Гейзенберга. В 1925 году Борн осознал, что квантовая физика требует радикально нового подхода к механике, и направил своего протеже Гейзенберга по пути, который привел к созданию первой версии квантовой механики. В критические моменты он помогал Гейзенбергу разобраться в запутанных вычислениях, чтобы прийти к правильной форме квантовой механики.

Но как в матричной форме квантовой теории Гейзенберга, так и в волновом подходе, разработанном Шрёдингером в 1926 году, Борн увидел общую тему: результаты представляли собой вероятности, а не абсолютные, детерминистические предсказания, характерные для классической физики. Более того, Борн понял, что эту вероятность можно получить, возведя модуль волновой функции в квадрат.

Использование волновой функции

Именно так квантовая физика преобразует вопросы импульса и положения в вероятности: с помощью волновой функции, квадрат модуля которой дает плотность вероятности того, что частица будет находиться в определенном положении или иметь определенный импульс. Другими словами, $|\psi(r, t)|^2 d^3r$ — это вероятность того, что частица будет обнаружена в элементе объема d^3r , расположенном в точке с радиус-вектором r в момент времени t . (Примечание: d^3r здесь не переменные, а обозначения из математического анализа.)

Помимо волновой функции в координатном пространстве $\psi(r, t)$, существует также версия волновой функции в пространстве импульсов: $\phi(p, t)$.



ЗАПОМНИ

Если отвлечься от математических обозначений, это означает, что уравнение (волновая функция) напрямую связано с тем, насколько вероятно, что физик увидит какой-либо конкретный результат, когда будет его искать. Это математический результат, который дает квантовая физика: волновая функция, которая дает вам вероятность. В классической физике вероятность является признаком неопределенности, но в квантовой физике вероятность — это то, в чем можно быть наиболее уверенным. Чтобы получить из всего этого конкретные ответы, нужно использовать символы и выполнять интегрирование вероятности по интересующей области. (К особенностям обозначений я вернусь в главе 7 для тех, кто хочет углубиться в математику.)

Эта книга в значительной степени посвящена изучению волновых функций различных типов и состояний частиц, включая волновые функции:

- » Свободных частиц
- » Частиц, захваченных в потенциалах
- » Сталкивающихся тождественных частиц
- » Частиц в гармоническом колебании
- » Рассеяния света на частицах

Используя квантовую физику, можно предсказать поведение всевозможных физических систем... что я и показываю в части 3 этой книги.

ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ И СУПЕРПОЗИЦИЯ: НОВЫЙ ВЗГЛЯД



ТЕХНИЧЕСКИЕ
ДЕТАЛИ

Поведение частиц и других объектов в квантовой физике определяется волновой функцией. Хотя более подробно о волновой функции рассказывается на протяжении всей книги, одно из ее следствий — интерференция — проявляется в моем обсуждении эксперимента с двумя щелями ранее в этой главе. (См. предыдущий раздел «Двойственная природа: взгляд на частицы как на волны» и главу 2, где обсуждается волновая интерференция.)

То же самое происходит с волновой функцией материи в эксперименте с двумя щелями: для двух волн материи, $\psi_1(r, t)$ и $\psi_2(r, t)$, именно разность фаз между ними создает интерференцию. *Суперпозиция волн* — это процесс объединения двух волн в одну комбинированную

волну или, в квантовой физике, в волновую функцию. Если у вас есть две волновые функции, вы можете сложить их амплитуды (но не интенсивности), чтобы получить одну суперпозиционную волновую функцию:

$$\psi(r, t) = \psi_1(r, t) + \psi_2(r, t)$$

Квантовая физика становится странной по сравнению с классической физикой именно потому, что понятия, которые четко определены в классической физике, такие как положение и импульс, превращаются в причудливую суперпозицию возможных квантовых состояний.

Новый взгляд на свет: квантовая электродинамика

Одним из результатов квантово-физических экспериментов стало осознание того, что свет распространяется малыми, дискретными, квантованными порциями энергии — фотонами. Но на протяжении девятнадцатого века физики однозначно придерживались представления о свете как о волне, что наиболее явно проявлялось в электромагнитных волнах, описываемых уравнениями Максвелла. Как могли существовать одновременно обе эти интерпретации?

Стремление разрешить это противоречие в конечном итоге привело к развитию *квантовой электродинамики*, или КЭД — сокращенного названия релятивистской квантовой теории электродинамики. Эта теория является квантовым аналогом классической электромагнитной теории Максвелла. Квантовая электродинамика объясняет взаимодействие между веществом и светом, а также между заряженными частицами.

Что же колеблется?

В конце 1800-х годов экспериментальные физики пытались подтвердить волновую интерпретацию света и электромагнитных волн, пытаясь обнаружить *эфир* (среду, которая переносила бы волны). Поскольку они не могли обнаружить его напрямую, они пытались сделать это косвенно, выявляя ожидаемое влияние движения эфира на путь света. Наиболее известными исследователями в этой области были Майкельсон и Морли, чьи эксперименты я подробнее обсуждаю в главе 2. Если вкратце: их попытки не увенчались успехом, потому что эфир, который они искали, на самом деле не существовало!



ЗАПОМНИ

Хотя квантовая физика устранила необходимость в эфире, она также предложила новое объяснение волнового поведения. Одним из первых открытий в квантовой физике стало понимание дуализма волн и частиц. Не только свет проявлял свойства и волн, и частиц, но и материя тоже. (См. раздел «Двойственная природа: взгляд на частицы как на волны» ранее в этой главе, где рассматривается волновая интерпретация материи.)

Но что же на самом деле *колеблется* в электромагнитной волне? Один из ответов заложен в самом фундаменте квантовой теории: это сама квантовая волновая функция. Поскольку волновая функция представляет вероятность нахождения фотона в определенном положении, когда вы рассматриваете эксперимент с двумя щелями (см. главу 2), одна из интерпретаций предполагает рассмотрение волновой функции как волны, проходящей через обе щели. Эта волна затем рассчитывается как суперпозиция двух волн, каждая из которых проходит через свою щель, а распределение фотонов образует интерференционную картину этих двух волновых функций. Согласно этой интерпретации, вероятность попадания фотонов на экран будет возрастать и убывать в соответствии с интерференционной картиной волн.

Попытка понять волновую интерпретацию света — это один из многих неинтуитивных результатов квантовой физики, поэтому если вам не совсем понятно приведенное здесь описание, вы находитесь в хорошей компании. Эйнштейн, как и некоторые другие ученые, считал эту идею бессмысленной, даже признавая общий экспериментальный успех квантовой теории. Значению этой интерпретации и спорам вокруг нее посвящена глава 6.

Первые проблески КЭД

В конечном итоге обнаружилось несоответствие между уравнениями Максвелла и квантовой физикой. Уравнения Максвелла описывали электромагнитную волну как непрерывную форму энергии, а в квантовой физике *ничто не было непрерывным*. На квантовом уровне энергия всегда была квантованной и дискретной. И хотя в макромасштабе энергия могла проявляться в соответствии с уравнениями Максвелла, фундаментальное физическое описание происходящего должно было соответствовать квантовой картине. После Второй мировой войны физики сосредоточили свое внимание на устранении противоречий между этими двумя подходами (непрерывным и дискретным).

Одним из первых физиков, взявшихся за решение этой задачи, был Поль Дирак, о котором я упоминаю в разделе «Доказательство позитрона? Дирак и рождение пар» ранее в этой главе. Он был одним из первых физиков, попытавшихся согласовать квантовую физику

с теорией относительности Эйнштейна. В статье 1927 года Дирак ввел термин *квантовая электродинамика* (КЭД) для описания этой взаимосвязи, вскоре после того, как была разработана квантовая механика, о чем говорится на протяжении всей этой главы.

Вот проблема, которую Дирак осознал в 1927 году: существующая классическая теория электромагнитного поля, основанная на уравнениях Максвелла, не соответствовала квантовой теории. Согласно принципу неопределенности, квантовые гармонические осцилляторы (см. главу 9) не могут быть полностью неподвижными. На квантовом уровне они должны постоянно двигаться и сохранять минимальное количество энергии.



ЗАПОМНИ

Подобно тому, как физикам пришлось преобразовать классическую механику в квантовую механику для объяснения поведения объектов в квантовом мире, им также требовалось преобразовать классическую электромагнитную теорию в новый тип квантовой теории поля для объяснения квантового поведения в электромагнитном поле.

Проблема, с которой столкнулась квантовая физика при попытке преобразования электромагнитной теории, заключалась в получении точных ответов. Хотя они могли получать очень хорошие приближенные ответы, используя метод, называемый *теорией возмущений*, в конечном итоге попытки сделать вычисления более точными приводили к расходящимся членам, стремящимся к бесконечности. Поскольку ничто в физическом мире не может обладать бесконечной энергией, эти бесконечные члены не могли отражать реальные физические результаты. Электромагнитной теории на квантовом уровне требовался способ корректного разрешения этих результатов.

НОВЫЙ ВЗГЛЯД НА ФИЗИЧЕСКИЕ ПОЛЯ

В одной из врезок главы 2 я рассказываю о том, как классическая физика эволюционировала от ньютоновского подхода, рассматривавшего отдельные материальные точки под действием сил, к более целостному представлению о полях. По сути, такой же переход произошел и в квантовой физике, когда физики переосмыслили исходные формулировки квантовой механики в рамках более всеобъемлющей *квантовой теории поля* (КТП).

Как упоминалось в разделе этой главы «Первые проблески КЭД», Поль Дирак осознал необходимость такого перехода в 1927 году, когда понял, что нужна *квантовая электродинамика* – квантовая теория электромагнитного поля. В конечном счете квантовая теория поля стала более общей, поскольку физики обнаружили существо-

вание других типов квантовых полей, таких как поля сильного и слабого ядерных взаимодействий.

Вы можете заметить явное противоречие между способами мышления, лежащими в основе этих двух подходов. Фейнман (см. следующий раздел «Фотон получает новую работу»), например, понимал полевой подход, но явно предпочитал говорить на языке частиц. Швингера всегда раздражал наглядный подход Фейнмана именно по этой причине; он считал, что тот побуждает людей думать о частицах, а не о квантовом поле.

Гравитационное поле остается единственным полем, которое физикам так и не удалось успешно описать в рамках квантовой теории поля. Поиск квантовой теории гравитации стал святым Граалем физики на целое столетие. Эйнштейн посвятил вторую половину своей жизни этим безуспешным поискам. Для более глубокого знакомства с попытками примирить квантовую физику и гравитацию я скромно рекомендую книгу «Теория струн для чайников» (Wiley, 2022).

Фотон получает новую работу

Одним из физиков, который долго и упорно размышлял над проблемой квантовой физики и волн, был Ричард Филлипс Фейнман. О Фейнмане написаны целые книги (некоторые из них — самим Фейнманом), и хотя жизни всех квантовых физиков, упомянутых в этой книге, были интересными, в Фейнмане я вижу что-то особенно вдохновляющее. Если вы хотите узнать о нем больше, обратитесь к посвященной ему статье в главе 16. А сейчас я сосредоточусь конкретно на его роли в развитии квантовой электродинамики.

Визуализация с помощью диаграмм Фейнмана

Фейнман провел значительную часть 1940-х годов, помогая разрабатывать ядерную бомбу в качестве ученого Манхэттенского проекта. (В то же время он самостоятельно научился виртуозно взламывать сейфы. Как я уже говорил, он был незаурядной личностью.) Но еще до этого он успел защитить докторскую диссертацию в 1942 году, в которой изложил некоторые ключевые идеи, ставшие основой квантовой электродинамики.

Одна из идей его докторской диссертации стала известна как *диаграммы Фейнмана* — визуальный подход к представлению квантовых взаимодействий. На этих диаграммах Фейнман изображал частицы с помощью различных типов линий. Частицы, такие как электроны, движущиеся в пространстве, показаны прямыми линиями. Фотоны изображаются волнистыми линиями. Оси графика представляют про-

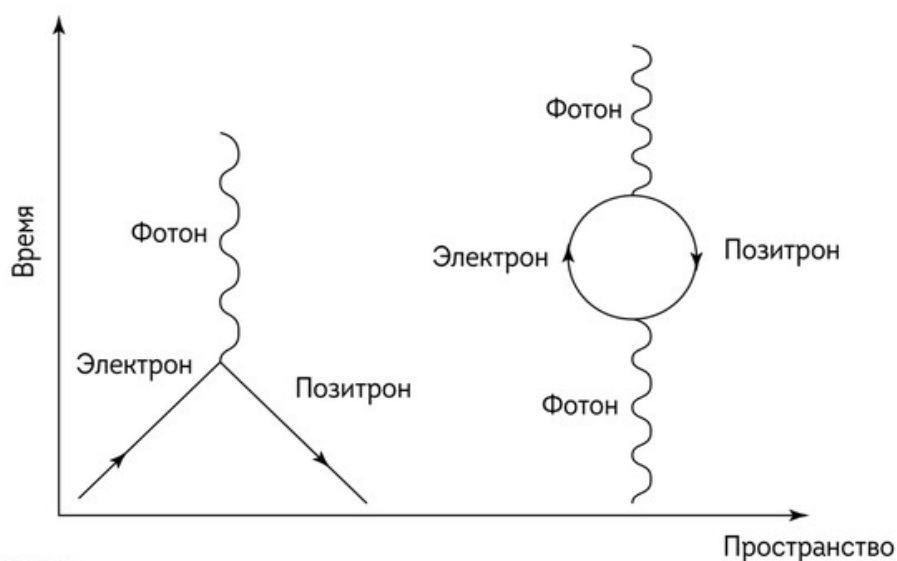


РИСУНОК 3-8:

(Слева) Частица и античастица аннигилируют друг с другом, испуская фотон. (Справа) Фотон расщепляется на частицу и античастицу, которые немедленно аннигилируют друг с другом.

пространство в горизонтальном направлении и время в вертикальном, поэтому они являются явной абстракцией и не определяют точно все пространство-время; тем не менее эти диаграммы служат инструментом для осмысления взаимодействий частиц. Примеры таких взаимодействий показаны на рисунке 3-8.

Диаграммы Фейнмана на рисунке 3-8 связаны с антиматерией, электроном и его античастицей — позитроном, о которых я рассказывал ранее в этой главе в разделе «Доказательство позитрона? Дирак и рождение пар». Так что же именно передают эти изображения? Прозрения Фейнмана, которые он отображает как визуально, так и математически, включают:

- » Позитрон можно представить как электрон, движущийся назад во времени. Электроны изображаются стрелками, движущимися вперед во времени, в то время как стрелки позитронов похожи, но движутся в противоположном направлении.
- » При столкновении позитронов и электронов образуются фотоны. Изображение слева (рисунок 3-8) показывает электрон и позитрон, движущиеся в пространстве. Когда электрон и позитрон сталкиваются, они прекращают существование, и из энергии их взаимной аннигиляции образуется фотон. Затем этот фотон движется вперед во времени. Впечатляет, не правда ли?
- » Виртуальные частицы могут существовать короткие промежутки времени. Изображение справа показывает, что на месте фотона образовались и электрон, и позитрон.

Эти *виртуальные частицы* существуют лишь мгновение, но притягиваются друг к другу, поскольку имеют противоположные заряды. Они сталкиваются друг с другом и аннигилируют. И снова новый фотон движется вперед от этой точки.

Ранее в этой главе (в разделе «Положение против импульса: принцип неопределенности Гейзенберга») я упоминал, что неопределенность во времени связана с неопределенностью в энергии согласно принципу неопределенности Гейзенберга. Один из способов понять возникновение виртуальных частиц таков: если временной промежуток достаточно короткий, виртуальные частицы могут «одолжить» энергию у вселенной для своего существования. Но такое возможно только при *невероятно* коротких промежутках времени.

Связь диаграмм Фейнмана с квантовой электродинамикой

Как же эти диаграммы Фейнмана связаны с развитием квантовой электродинамики? Рисунок 3-9 наилучшим образом демонстрирует эту связь — на нем показаны два электрона, приближающихся друг к другу. Неудивительно, что поскольку оба имеют отрицательный заряд, они отталкиваются друг от друга и начинают двигаться в противоположных направлениях. Хорошо, это ожидаемо. Однако что за волнистая линия посередине? Это фотон.



ЗАПОМНИ

Классическая электродинамика утверждает, что электромагнитная сила между любыми двумя объектами, такими как два электрона, переносится в форме электромагнитной волны — а электромагнитная волна является более общим случаем световой волны. (Подробнее об этом см. в главе 2.)

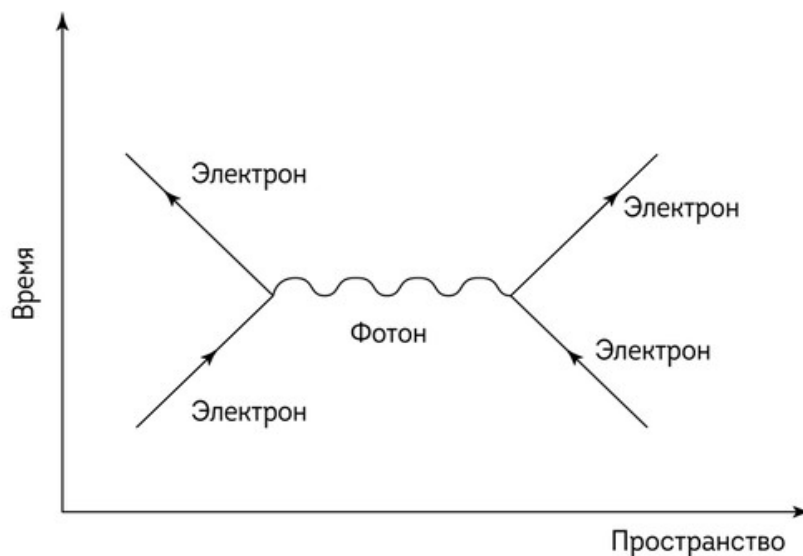


РИСУНОК 3-9.

Диаграмма Фейнмана показывает, как две частицы взаимодействуют друг с другом.

Таким образом, если два электрона взаимодействуют благодаря электромагнитной силе между ними, эта сила должна переноситься фотоном. Фактически, диаграмма Фейнмана (и более строгие математические выкладки в его докторской диссертации) предсказывала, что фотон возникнет на краткий миг специально для осуществления взаимодействия между этими двумя частицами. Это *виртуальный фотон*.



ПОДСКАЗКА

На самом деле, в квантовой электродинамике считается, что электромагнитная сила *опосредуется* фотоном. Фотон — это частица, которая передает информацию об электромагнитном поле, и, следовательно, об электромагнитной силе, различным объектам внутри поля. И именно это показано на рисунке 3-9.

Конечно, Фейнман не был одинок в своей работе в этой области. Большинство физиков подходили к этой проблеме, используя полевые операторы — более традиционный подход к концепции. Среди физиков, которые сделали некоторые из наиболее революционных связанных с этим открытий, были Джулиан Швингер, Синъитиро Томонага, Фримен Джон Дайсон и Мюррей Гелл-Манн.

Именно Дайсон показал в 1949 году, что эти два подхода — графический метод Фейнмана и более операторный метод других исследователей — эквивалентны. За эти исследования Швингер, Томонага и Фейнман позже разделили Нобелевскую премию по физике 1965 года.

Взламывая атомные части

Другая серия революционных открытий в физике проходит через начало двадцатого века, достигает своей кульминации в конце Второй мировой войны и продолжается дальше. Эта серия не является параллельным треком развитию квантовой физики. Эти направления больше похожи на две длинные тропы, идущие через один лес, извивающиеся и пересекающиеся в нескольких местах, порой даже сливающиеся в единый путь на какое-то время.

Открытие квантовой теории было связано с излучением энергии атомами, а применение Бором квантовой теории для описания атомной структуры действительно придало импульс принятию как квантовой, так и атомной теории. Квантовые прозрения вели к открытию новых частиц, включая более мелкие структуры внутри атома, такие как положительно заряженный протон и незаряженный нейтрон.

Это растущее понимание атомной структуры, ставшее возможным благодаря квантовой теории, позволило физикам начать объяснять такие явления, как радиоактивный распад. В главе 2 я упоминаю, что создатель периодической таблицы элементов Дмитрий Менделеев

даже не верил в атомную теорию. Теперь же глубинные структурные свойства различных атомных элементов явно объясняли организационную структуру этой самой таблицы.

Столкновение частиц для получения информации

Многие физики, уже упомянутые в этой главе, собрались в рамках Манхэттенского проекта для создания первой атомной бомбы (или, в случае Гейзенберга, для работы над немецким аналогом). И хотя эти усилия привели к смерти и разрушениям, они также проложили путь к исследованиям и знаниям, что выразилось в развитии ускорителей частиц после Второй мировой войны.

В ускорителе частиц, как следует из названия, физики используют мощные, сфокусированные магнитные и электрические поля для ускорения заряженных частиц. А затем, когда частицы разгоняются до достаточной скорости, их сталкивают с чем-нибудь. Этим «чем-нибудь» могут быть либо другие быстро движущиеся частицы, либо какой-то неподвижный объект. После чего ученые наблюдают за тем, что происходит.

Во время летней стажировки в Университете Индианы в Блумингтоне я работал на ускорителе частиц. Моя работа заключалась в том, чтобы направлять пучок сильно заряженных частиц на пленку, которая меняла цвет при воздействии радиации, а затем использовать это изменение цвета для расчета уровня излучения. Университет также использовал ускоритель для тестирования деталей спутников, наблюдая за реакцией электронных схем при облучении заряженными частицами. (Образцы калиброванной пленки из моих экспериментов помещались в ускоритель вместе с деталями спутников, чтобы позже можно было проверить эти образцы и получить более точные измерения уровня радиации в различных точках устройства.)



ЗАПОМНИ

В послевоенные годы физики многое узнали, сталкивая высокоскоростные частицы и атомы друг с другом. Фактически, они узнали так много, что обнаружили совершенно новые типы сил внутри атома, о существовании которых раньше не подозревали.

Что удерживает атомное ядро

Прежде чем углубляться в изучение атомных сил, важно помнить, что уже известные вам сведения об атоме весьма полезны. Например, вы знаете, что атомы имеют положительно заряженное ядро, вокруг кото-

рого движутся электроны. Модель атома Бора (см. раздел «Атомная модель Бора» ранее в этой главе) объяснила, почему эти электроны не падают на положительно заряженное ядро.

Когда физики начали более детально изучать структуру атома, они обнаружили, что атомное ядро содержит:

- » Протоны: положительно заряженные частицы
- » Нейтроны: нейтральные (не имеющие заряда) частицы

Открытие этих субатомных частиц и целостности ядра ясно показало, что внутри самого атома должна существовать некая сила, удерживающая ядро вместе. Положительно заряженные протоны *должны* были бы отталкиваться друг от друга. И поскольку они находятся так близко друг к другу, сила этого отталкивания должна быть невероятно мощной. Что-то должно было удерживать эти протоны и нейтроны вместе, причем с силой, достаточной для преодоления электромагнитного отталкивания между протонами.

Действительно, исследования показали, что внутри атома существуют две ядерные силы.

- » **Слабое ядерное взаимодействие:** Взаимодействие, которое связывает частицы и примерно в 100 000 раз слабее электромагнитного взаимодействия.

Слабое ядерное взаимодействие связано с распадом частиц и осуществляется посредством частиц, имеющих довольно скучные названия – *W-бозоны* и *Z-бозоны*.

- » **Сильное ядерное взаимодействие:** Взаимодействие, связывающее протоны и нейтроны, которое значительно сильнее всех других известных сил.

Подобно электромагнитной силе, сильное ядерное взаимодействие также передается посредством частицы. (Подробнее об этом см. в предыдущем разделе.) Но вместо фотона частицей-переносчиком сильного ядерного взаимодействия является глюон. Эти глюоны не только удерживают вместе протоны и нейтроны; они также действуют внутри протонов и нейтронов, связывая их составные части, которые называются кварками!



ЗАПОМНИ

Именно сильное ядерное взаимодействие отвечает на вопрос о том, что удерживает атомное ядро вместе. Когда два протона находятся близко друг к другу или к нейтрону, они связываются этой мощной силой, которая преодолевает отталкивающее электромагнитное взаимодействие.

После создания квантовой теории поля работа в квантовой физике во второй половине двадцатого века сосредоточилась на экспериментальных исследованиях, направленных на изучение всех составляющих частей. Эта работа привела к созданию Стандартной модели физики частиц, которая считается завершенной в 2013 году с открытием частицы, называемой *бозоном Хиггса*. Более подробно об этом я расскажу в главе 5.

2

**ОСНОВЫ:
ПРИНЦИПЫ
И ТЕОРИИ
КВАНТОВОЙ
ФИЗИКИ**

В ЭТОЙ ЧАСТИ...

Узнаете, что квантовая физика говорит о состояниях частиц.

Вспомните, как квантовая физика произвела революцию в нашем понимании электромагнетизма и материи.

Исследуете основные интерпретации, противоречия и дебаты в квантовой физике.

В ЭТОЙ ГЛАВЕ...

- » Изучение роли квантовых чисел
- » Узнаете, как спин определяет частицы
- » Погрузитесь глубже в тему корпускулярно-волнового дуализма
- » Определение природы антиматерии

Глава 4

Квантовая механика: Состояния частиц и дуализм

В квантовой физике обычно рассматривают отдельные частицы и то, как они себя ведут. (К системам множества частиц мы немного вернемся в главе 15.) В основе этого изучения лежит понимание того, что квантовая физика определяет отдельные частицы через их квантовые состояния. Предположим, что частица находится в определенном состоянии в какой-то момент; дальнейшее исследование частицы означает изучение вероятности того, что частица будет находиться в других определенных состояниях в другие моменты времени.

В этой главе вы узнаете о квантовых состояниях частиц. Я начну с объяснения квантовых чисел, которые физики используют для описания квантовых состояний, и некоторых конкретных способов проявления этих состояний в физике. Затем я вернусь к идее корпускулярно-волнового дуализма, представленной в главе 3, которая является центральной в квантовой физике. Наконец, я немного расскажу о том, как квантовая физика привела ученых к предсказанию, а затем и открытию антиматерии.

Квантование и квантовые числа

В квантовой физике частицы находятся в определенных состояниях, которые представляются последовательностью чисел. Числа, используемые физиками для описания квантового состояния, называются *квантовыми числами*.

Нильс Бор впервые применил этот подход, когда разработал боровскую модель атома, описанную в главе 3. Он пытался описать физическое состояние электронов в атоме водорода. Его первоначальный подход включал только одно квантовое число n , которое начиналось с 1 и увеличивалось на целые значения, так что состояния электронов описывались как $n = 1, 2, 3, \dots$

Хотя модель Бора объясняла многое, она не была полной. Последующие исследования показали, что структура электронов в атоме с квантово-механической точки зрения оказалась еще более тонкой, чем предполагал Бор изначально. Для описания структуры электронов потребовались два дополнительных квантовых числа — l и m .

Квантовое число n встречается в уравнениях начиная с главы 8, а квантовые числа l и m появляются только в главе 10.

Вечно вращающийся электрон

Существует еще одно квантовое число, присущее всем частицам. Это число не зависит от физического положения частицы в атоме, а является более фундаментальным свойством — называемым *спином* — и обозначается квантовым числом s .

Если кратко, *спин* представляет собой своего рода внутренний угловой момент частицы. Я посвящаю спину всю главу 11, так что если вы хотите узнать, как он был открыт, а также получить более подробную информацию о том, как с ним работать, обратитесь к ней. Но я уделю немного времени объяснению этого понятия и в этой главе, поскольку оно является центральным для физики частиц.

Представьте себе вращающийся баскетбольный мяч, скажем, на пальце баскетболиста. Этот мяч обладает угловым моментом. Баскетболист, вращая мяч определенным образом, может увеличивать или уменьшать его вращение, тем самым увеличивая или уменьшая угловой момент мяча. Это классический способ рассмотрения концепции вращения.

Квантовая физика говорит нам, что электрон — как и любая фундаментальная частица — имеет совершенно иное отношение к вращению. Каждый электрон идентичен любому другому электрону, и они, по сути, являются точечными частицами. Другими словами, невозможно «раскрутить» электрон так, как можно раскрутить баскетбольный мяч. И поэтому нельзя увеличить или уменьшить угловой момент таким способом. Единственный угловой момент, которым обладает электрон, связан со спином, внутренне присущим атому.

ЗНАКОМСТВО С КВАНТОВЫМИ БИТАМИ, ИЛИ КУБИТАМИ

Компьютеры имеют логическую структуру, основанную на двоичных разрядах, или битах. Они являются центральным элементом компьютерной архитектуры и представляют собой переключатели внутри компьютера, которые могут находиться либо в состоянии «включено», либо «выключено», что численно представляется как 1 или 0.

Спин электронов создает похожую ситуацию, что натолкнуло некоторых исследователей на идею квантового бита, или *кубита*, выполняющего аналогичную функцию. Однако кубит не находится однозначно в одном из состояний — и именно в этом заключается квантово-механическое «волшебство», делающее кубит таким интересным.

В квантовой физике частица существует в суперпозиции различных возможных состояний до тех пор, пока кто-то не произведет ее измерение. Таким образом, если бит в обычном компьютере — это переключатель, который либо включен, либо выключен, то кубит может находиться (как электрон) в состоянии, где у него 67 процентов вероятности иметь спин вверх (положение «включено») и 33 процента вероятности иметь спин вниз (положение «выключено»). К этой концепции мы вернемся в главе 5, где обсудим идею создания квантового компьютера и где кубиты действительно выйдут на первый план!



ПОДСКАЗКА

Более того, спин электрона всегда имеет постоянное значение, обозначаемое как $\frac{1}{2}$ в единицах приведенной постоянной Планка. Но направление спина может быть одним из двух: либо спин вверх, либо спин вниз, что обозначается как $s = +\frac{1}{2}$ или $s = -\frac{1}{2}$. Это похоже на баскетбольный мяч, который вращается ровно с частотой один оборот в секунду либо по часовой стрелке, либо против. Нет никакого замедления, остановки и смены направления — только одно направление с этой скоростью или противоположное. Эта совершенно безумная идея — то, что нам говорит квантовая физика. (Подробности о квантовой физике углового момента приведены в главе 10, а о спине — в главе 11, если вы хотите глубже разобраться в экспериментах и математике, которые привели к этому удивительному выводу.)

Фермионы и бозоны

Причина, по которой спин стал таким важным свойством в квантовой физике, связана с количеством частиц, открытых физиками. Когда атом начали исследовать в ускорителях частиц, стало очевидно, что его внутренняя структура намного сложнее, чем считалось ранее.



ЗАПОМНИ

В то время как электроны внутри атома являются самостоятельными частицами, которые нельзя разделить на более мелкие составляющие, протоны и нейтроны, составляющие атомное ядро, действительно можно разбить на еще более мелкие частицы. И эти мельчайшие частицы из протонов и нейтронов были не единственными открытыми частицами. Используя ускорители частиц, физики обнаружили множество новых частиц, некоторые из которых блуждают в космическом пространстве, а другие существуют лишь доли наносекунды в лабораторных условиях, прежде чем распасться.

Стало очевидно, что структура этих частиц тесно связана с их спином. Частицы с полуцелым спином, такие как электрон, ведут себя принципиально иначе, чем частицы с целым спином, как, например, фотон.

Частицы с полуцелым спином называются *фермионами*. Частицы с целым спином называются *бозонами*. Когда мы имеем дело с множеством частиц, о чем я рассказываю в главе 15, эти разные типы частиц демонстрируют совершенно разное поведение. Подробнее о различиях между этими типами частиц я также рассказываю в главе 5.

Переосмысляя корпускулярно-волновой дуализм

Одним из самых неожиданных открытий квантовой физики стал корпускулярно-волновой дуализм. Сначала физики обнаружили, что свет ведет себя не только как волна, но и как частица. Затем они выяснили, что частицы, такие как электроны, также могут вести себя как волны! Такое необычное поведение проявляется не всегда, а только в специально сконструированных экспериментах — например, в опыте с двумя щелями, который я обсуждаю в главах 2 и 3.

Происхождение корпускулярно-волнового дуализма

Именно Луи де Бройль обнаружил, что материальные частицы могут вести себя как волны, и вывел уравнение, определяющее *длину волны де Бройля*, λ , для волны материи:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

В этом уравнении h — постоянная Планка, а p — импульс частицы. Импульс частицы p равен массе m , умноженной на скорость v ($p = mv$),

если частица движется со скоростью, много меньшей скорости света, поэтому уравнение можно также записать как:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Это уравнение наглядно показывает, почему корпускулярно-волновой дуализм так сложно наблюдать. Рассмотрим следующие моменты, связанные с массой m , которая находится в знаменателе уравнения:

- » При рассмотрении частиц с все большей массой – то есть при увеличении значения m – длина волны становится настолько малой, что волновые свойства материи становятся невозможно наблюдать.
- » При рассмотрении частиц с все меньшей массой – то есть при уменьшении значения m – длина волны увеличивается, и, следовательно, ее становится легче наблюдать. Однако даже в этом случае необходимо тщательно конструировать экспериментальные установки.

Фактически, де Бройль предложил идеи таких экспериментов в своей докторской диссертации 1924 года, где он вывел это уравнение и ввел концепцию волн материи. Его идеи получили экспериментальное подтверждение в 1927 году.

Значение корпускулярно-волнового дуализма

Корпускулярно-волновой дуализм имеет принципиальное значение в квантовой физике, поскольку в основе квантовой физики лежит величина, называемая квантовой волновой функцией, которая обычно обозначается как ψ (хотя иногда используются и другие символы). Даже когда речь идет об одной частице, в квантово-физическом смысле мы фактически говорим о волновой функции, описывающей эту отдельную частицу. В частях 3 и 4 этой книги мы гораздо глубже погрузимся в математический аппарат работы с этой волновой функцией.

В волновых функциях свойства отдельных частиц и волн сливаются воедино. При правильной постановке задачи и анализе волновая функция может использоваться для расчета вероятности того, что частица будет находиться в определенном состоянии или положении в заданный момент времени. Расчет не дает точного ответа, а только вероятность. Именно поэтому неопределенность является столь важной особенностью квантовой физики, как описано в главах 1 и 3.

Однако как только вы проводите измерение, чтобы определить местоположение частицы, речь уже идет не о волновой функции. Теперь вы имеете дело с реальной частицей, которая находится в конкретном определенном состоянии. В момент измерения вы знаете, в каком состоянии находится частица, и больше не нужно говорить о ней в терминах чистой вероятности.

В главе 6 вы узнаете, как различные интерпретации квантовой физики подходят к этому переходу от вероятностной волновой функции к конкретному значению.

Понимая суть антиматерии

Вскоре после того, как Вернер Гейзенберг вывел исходные уравнения квантовой механики, произошла любопытная вещь. Физик Поль Дирак начал работать над версией квантовой механики, которая согласовалась бы со специальной теорией относительности Эйнштейна, и вывел уравнение, описывающее электрон. Проблема заключалась в том, что формула допускала наличие у электрона как положительного, так и отрицательного заряда, хотя электрон всегда имел отрицательный заряд.

Если бы на этом история закончилась, Дираку просто нужно было бы модифицировать свое уравнение так, чтобы оно давало только отрицательные результаты. Но через несколько лет физики действительно обнаружили положительно заряженную частицу, предсказанную уравнением! (Подробнее об этом в главе 3.)

Эта новая частица получила название позитрон, и она была точной копией электрона, за исключением того, что имела положительный электрический заряд. Позитрон оказался античастицей электрона и первым примером антиматерии.



ЗАПОМНИ

Растущие исследования в области ускорителей частиц показали, что позитрон был не единственной античастицей в физике. Ключевая особенность антиматерии заключается в том, что при встрече с обычной материей частицы и античастицы аннигилируют друг друга с выделением энергии в виде фотонов. (Поскольку фотоны не имеют электрического заряда, антифотона не существует... или, если посмотреть на это иначе, антифотон — это тот же самый фотон. Он сам является своей античастицей.)

В ЭТОЙ ГЛАВЕ...

» Увидим, как квантовая физика объясняет фундаментальные силы

» Узнаем об изобретениях, полученных на основе квантовой физики

» Взглянем на возможности квантовых вычислений

Глава 5

Квантовая электродинамика и то, что за ней

После того как в 1920-х годах были заложены основные идеи квантовой физики, Вторая мировая война несколько отвлекла исследования в этой области. Команда Манхэттенского проекта добилась грандиозного (и ужасного) успеха в создании атомной бомбы, а величайшие физики нового поколения — для которых квантовая физика была уже хорошо известна еще до поступления в колледж — стремились еще глубже исследовать квантовый мир. Они посвятили себя превращению квантовой физики в теорию, которая лежала бы в основе понимания практически всех аспектов физического мира.

В этой главе вы узнаете, как физики середины двадцатого века объясняли структуру материи и энергии (почти полностью) с точки зрения квантовой физики. Вы познакомитесь с некоторыми изобретениями, появившимися в результате квантовой революции — изобретениями, которые сейчас настолько повсеместны, что большинство людей даже не осознают, насколько они от них зависят. Затем вы познакомитесь с чем-то, что кажется научной фантастикой: удивительной возможностью квантовых вычислений.

Квантовая теория поля: Объяснение материи и энергии

Исследования в области квантовой физики привели к удивительным достижениям в середине двадцатого века и объяснили (на самом фундаментальном уровне) практически все, что касается мате-

рии и энергии. В Главе 2 я описываю идеи классической физики, на понимание и уточнение которых ушли столетия. За несколько десятилетий — начиная с того момента, когда Макс Планк впервые предложил квантование физических свойств в 1900 году (подробнее об этом предложении читайте в главе 3) — физики использовали идею Планка для объяснения природы электромагнетизма, а также сил, удерживающих атомы вместе!

Основой этих революционных идей стала квантовая теория поля — подход к квантовой физике, использующий концепцию полей. Поле в физике — это модель, где пространство заполнено физической величиной, имеющей определенное значение в каждой точке пространства и времени. Если поле также имеет направление, оно называется *векторным полем*. (Подробнее о полях читайте в главах 2 и 3.)



ПОДСКАЗКА

Квантовая теория поля определяет квантовую физику через квантовое поле, которое пронизывает все пространство и обладает *энергией* (скалярной величиной) и *импульсом* (вектором, имеющим как величину, так и направление) во всем пространстве и времени. Используя это определение, можно рассматривать квантовые взаимодействия как связанные с поведением этого поля в данной точке пространства.

Я не буду углубляться в этот теоретический подход, и даже в математических разделах частей 3 и 4 я избегаю прямого погружения в математику квантовой теории поля. Но сейчас я хочу, чтобы вы увидели, как эта важная концепция проявляется в квантовой теории.

Возвращаясь к квантовой электродинамике

Квантовая электродинамика, или КЭД, — это квантовая теория, описывающая электромагнетизм. Я рассматривал историю ее развития в главе 3, но здесь я хочу более глубоко погрузиться в то, как на самом деле работает электромагнетизм.

Одно из важных следствий уравнений Максвелла (см. главу 2) заключается в том, что электричество и магнетизм — это связанные, единые силы, которые могут проявляться в виде электромагнитной волны, воздействующей на заряженные частицы. Кроме того, эти уравнения описывают свет как форму электромагнитной волны.



ПОДСКАЗКА

Первый важный вывод квантовой физики, относящийся к электродинамике, состоит в том, что свет состоит из фотонов. Следовательно, электромагнитная волна, управляющая электричеством и магнетизмом, также должна состоять из фотонов. Другими словами, именно

фотоны выполняют работу по созданию электричества и магнетизма, то есть электромагнитной силы!

Это понимание является отправной точкой в осмыслении квантовой электродинамики. Рассмотрим один из простейших случаев — взаимодействие двух электронов. Оба они имеют отрицательный заряд, поэтому, согласно классической физике, они должны отталкиваться. Но почему? Потому что электромагнитная волна передает взаимодействие между ними. С точки зрения квантовой физики происходит следующее: электроны генерируют и обмениваются фотонами. В терминах квантовой физики фотон является посредником электромагнитной силы и служит частицей, которая передает информацию о силе между электронами.

Это ключевое открытие приписывают в основном Ричарду Фейнману, и оно стало одной из причин присуждения ему Нобелевской премии по физике. В главе 3 показано взаимодействие двух частиц через фотон с помощью диаграммы Фейнмана, как описано в предыдущем абзаце. И дело не только в том, что он придумал эффектную графику. Фейнман также разработал математический аппарат для этого описания!

КЭД невероятно важна, поскольку она описывает электромагнетизм — чрезвычайно важное взаимодействие — на квантовом уровне. Атомы окружены оболочками электронов, находящихся в различных квантовых состояниях, и когда два объекта соприкасаются, фактически взаимодействуют именно внешние электронные оболочки. Практически любое физическое взаимодействие в нашей повседневной жизни в конечном счете объясняется электромагнетизмом!

Изучение ядерных сил и квантовой хромодинамики

После создания основ КЭД физики также начали исследовать структуру атома. Они обнаружили, что внутри атома действуют еще две силы помимо электромагнетизма. Эти силы известны как слабое ядерное взаимодействие и сильное ядерное взаимодействие (о которых я рассказываю в главе 3), и их названия отражают их относительную силу.

Обе силы также можно объяснить с помощью квантовой теории поля. Вместо того, чтобы передаваться фотонами, эти силы передаются другими типами частиц, которые, как и фотон, являются бозонами. Но частицы, переносящие ядерные силы, называются *калибровочными бозонами* (как и другие частицы-переносчики взаимодействий)

и существуют как виртуальные частицы, появляющиеся исключительно для передачи взаимодействий между частицами в квантовой теории поля. (См. врезку «Теория всего?» рядом, где обсуждается, как эта же идея может быть связана с силой гравитации.)



ЗАПОМНИ

Теория, описывающая сильное ядерное взаимодействие, в котором кварки взаимодействуют через калибровочные бозоны, называемые *глюонами*, известна как *квантовая хромодинамика* или КХД. Это название происходит от квантового числа, называемого *цветом*, которое играет роль, аналогичную электрическому заряду.

Глюоны выполняют две основные функции в квантовой хромодинамике:

- » Удержание протонов и нейтронов вместе: Протоны внутри ядра обмениваются виртуальными фотонами (поскольку они оба имеют положительный заряд), и эти виртуальные фотоны заставляют протоны электромагнитно отталкиваться друг от друга (в соответствии с КЭД). Но они также обмениваются виртуальными глюонами, и эти виртуальные глюоны заставляют их связываться в атомное ядро.

Сильное ядерное взаимодействие, передаваемое этими виртуальными глюонами, удерживает протоны (и нейтроны) вместе с большей силой, чем виртуальные фотоны пытаются их оттолкнуть. Сильное ядерное взаимодействие намного мощнее электромагнитного.

- » Удержание кварков вместе для формирования протонов и адронов: Протон делим. Он фактически состоит из трех различных частиц, называемых *кварками*, которые удерживаются вместе глюонами!



ПОДСКАЗКА

Вы никогда не встретите случайный глюон (калибровочный бозон сильного ядерного взаимодействия) просто так. Он существует исключительно для того, чтобы удерживать кварки вместе в протонах или нейтронах, или для удержания протонов и нейтронов вместе. У этих виртуальных частиц есть своя работа!

Бозон Хиггса

Последняя частица, заслуживающая упоминания — это бозон Хиггса. Он был предсказан как следствие квантовой теории поля в качестве частицы, необходимой для объяснения некоторых асимметрий в математической модели. Если говорить упрощенно, теория *бозона Хиггса* объясняет, почему любая частица вообще обладает массой.

Если быть немного точнее, объяснение, предложенное Питером Хиггсом (и другими учеными), заключалось в том, что пространство заполнено скалярным полем, называемым полем Хиггса, и через взаимодействие с этим скалярным полем частицы проявляют массу. Одним из следствий этого предсказания было то, что определенные взаимодействия должны приводить к проявлению частицы — бозона со спином 0, — которую называли бозоном Хиггса. Существование бозона Хиггса было подтверждено 14 марта 2013 года на основе исследований на Большом адронном коллайдере в комплексе ЦЕРН в Женеве, Швейцария.

ТЕОРИЯ ВСЕГО?

Хотя квантовая физика может объяснить многие фундаментальные силы, которые удерживают частицы вместе (или отталкивают их друг от друга), физикам пока не удалось найти способ дать квантово-физическое описание гравитации или создать теорию *квантовой гравитации*. Гравитация описывается теорией относительности Эйнштейна. И хотя она прекрасно работает при описании крупных объектов — планет, звезд и галактик — эта теория не согласуется с квантово-физическим подходом, который действует на субатомном уровне.

За прошедшие годы ученые предприняли множество попыток объединить гравитацию с квантовой физикой: от одержимости Эйнштейна Великой объединенной теорией до более современного подхода теории суперструн. Эти попытки объяснения представляют собой поиск «теории всего», поскольку они отражают надежду на то, что квантовая физика и теория относительности — будучи объединенными — предложат полное фундаментальное описание реальности.

Многие физики, работающие в этой области, предполагают, что теория квантовой гравитации будет похожа на теории других фундаментальных взаимодействий, хотя и будет иметь дело с крупными объектами масштаба камней, людей, планет и звезд, а не электронов, кварков и атомов. Одно из предсказаний заключается в том, что квантовая гравитация также должна передаваться через калибровочный бозон. Этот гипотетический калибровочный бозон получил название *гравитон*. Предполагается, что этот гипотетический гравитон должен иметь спин 2 и быть безмассовым (поскольку он должен двигаться со скоростью света).

В последние годы ученые использовали Большой адронный коллайдер для обнаружения бозона Хиггса и проводили астрономические наблюдения для регистрации гравитационных волн. Однако такие эксперименты все еще не обнаружили гравитон. Таким образом, у исследователей нет ни экспериментальных доказательств существования гравитона, ни даже, на данный момент, связной теории квантовой гравитации, которая могла бы направлять поиски!

Открывая возможности квантовой физики

Многие темы в этой книге могут показаться абстрактными, поэтому я рад дойти до момента, когда могу сосредоточиться на некоторых конкретных следствиях квантовой физики. Когда я пишу эту книгу, прошло почти столетие с тех пор, как Вернер Гейзенберг собрался с друзьями, чтобы разгадать код, который создаст формальную математическую основу (матрицы) для квантовой механики. За прошедшее время открытия квантовой физики привели к созданию технологий, которыми люди пользуются ежедневно — обычно не задумываясь о том, насколько они революционны.

Да будет свет из лазеров

Лазерные технологии стали вездесущими в нашем мире, и они определенно не могли бы существовать без понимания квантовой физики. Как и многие озарения и открытия, описанные в этой книге, развитие лазеров началось с Альберта Эйнштейна.

Рассмотрим атом в возбужденном энергетическом состоянии. Это возбужденное состояние возникает, когда электрон переходит на более высокий энергетический уровень внутри атома. (Энергетические состояния атома водорода рассматриваются в главе 14.) Однако такое повышенное энергетическое состояние не может длиться вечно. В конце концов электрон высвобождает эту энергию, переходя обратно в состояние с более низкой энергией. Когда это происходит, высвобождение энергии в форме фотона называется *спонтанным излучением*. Испускаемый при этом процессе свет имеет случайную фазу и направление.

В 1917 году Эйнштейн предсказал возможность *вынужденного излучения*, которое происходит, когда фотон взаимодействует с атомом в возбужденном энергетическом состоянии и заставляет этот атом перейти в состояние с более низкой энергией. Согласно этой теории, исследователи должны были найти способ стимулировать возбужденные атомы так, чтобы они испускали свет с одинаковой фазой и направлением.

Физики провели эксперименты, связанные с теорией вынужденного излучения, и добились успешных результатов, создав следующие устройства:

- » Мазеры: В начале 1950-х годов физики создали устройство для «усиления микроволн с помощью вынужденного излучения», *microwaved amplification by stimulated*

emission of radiation, или *мазер*. Поскольку микроволны невидимы, это устройство не создавало того светового шоу, которое люди теперь ожидают от лазеров.

- » Лазеры: К 1958 году они развили принципы работы мазера для создания оптического мазера, который остроумно переименовали в *лазер* (от «усиление света с помощью вынужденного излучения», light amplification by stimulated emission of radiation).



ЗАПОМНИ

Лазеры — поистине универсальное открытие, основанное на принципах квантовой физики, — используются во многих отраслях: от информационных технологий до хирургии. Ключ к пониманию того, почему лазер настолько полезен — и является чем-то бóльшим, чем просто красивый свет — кроется в различии между спонтанным излучением (со случайной фазой и направлением) и вынужденным излучением (с одинаковой фазой и направлением). Весь свет в лазере находится в одной фазе, что позволяет тщательно отслеживать и измерять изменения этого света. Невозможно использовать случайное световое излучение для считывания штрих-кода в продуктовом магазине, но когда весь свет находится в одной фазе, лазер может точно считать штрих-код.

Управление потоком с помощью полупроводников и транзисторов

Растущее понимание материи, которое пришло с квантовой физикой и исследованием атома, привело к возможности создавать совершенно новые материалы, которые не встречаются в природе в готовом виде. Рост использования электричества напрямую связан с нашим растущим пониманием материаловедения. Электричество легко течет через *проводник* — материал, такой как медная проволока, который легко пропускает электрический ток. Другие материалы, такие как дерево, являются плохими проводниками и полностью останавливают поток электричества.

Но квантовая физика дала исследователям доступ к материалам, которые не просто существуют в природе (как медь и дерево). Вместо этого эти материалы позволили исследователям создавать устройства, обеспечивающие детальный уровень контроля над потоком электронов в электрических цепях. К таким устройствам относятся:

- » **Полупроводники**, которые в одних ситуациях действуют как хорошие проводники, но также могут быть модифицированы для ограничения потока электронов. Особые физические свойства полупроводника позволяют вклю-

чать и выключать поток электричества через переход или переключатель и, таким образом, иметь большой контроль над электрическим потоком.

- » **Транзисторы**, которые применяют идею полупроводимости в миниатюрных электронных устройствах. В транзисторе поток электричества к одному набору выводов высвобождает электроны для течения в противоположном направлении. Транзистор реагирует на электрический входной сигнал и соответственно направляет поток тока. Первый транзистор был создан в 1947 году, и физики, сконструировавшие его, получили Нобелевскую премию по физике 1956 года.

Использование ядерной энергии

Квантовая физика привела к созданию ядерной бомбы в рамках Манхэттенского проекта и в конечном итоге положила начало ядерной эпохе. Хотя ядерная бомба была разрушительным проявлением этой эпохи, с другой стороны, это привело к растущему пониманию возможностей человечества по извлечению энергии из ядерных взаимодействий.

Энергия посредством ядерного деления

Ученые создали успешные ядерные энергетические реакторы, основанные преимущественно на *делении ядер*, которое подразумевает использование нестабильных атомов (обычно с большим количеством протонов в ядре) и извлечение энергии при распаде этих частиц или их активном расщеплении. Этот процесс сложен и требует очистки радиоактивного материала для использования в качестве топлива в ядерном реакторе.

Использование реакторов ядерного деления имеет свои плюсы и минусы.

- » **Снижение зависимости от ископаемого топлива:** Когда частицы в этом ядерном материале распадаются, они выделяют энергию в форме тепла. Это тепло, в свою очередь, заставляет воду превращаться в пар, который создает силу, необходимую для вращения огромных турбин. Таким образом, по сути, ядерный реактор – это просто большая паровая турбина, где вместо сжигания ископаемого топлива используется ядерный распад.

- » Производство радиоактивных отходов: По мере распада материалов ядерного деления образуются радиоактивные топливные стержни, которые уже не генерируют полезное количество энергии, но все еще достаточно активны, чтобы производить радиоактивные отходы, требующие тщательной утилизации.

Существует ли более чистая форма ядерной энергии? Возможно.

Энергия термоядерного синтеза

Одна из целей будущего ядерной энергетики — *термоядерный синтез*, который происходит, когда два более легких элемента объединяются в один более тяжелый атом. Этот процесс происходит внутри звезд, так что его эффективность в производстве тепла и света доказана — по крайней мере, в звездах.

Звезды способны поддерживать термоядерный синтез благодаря своей огромной массе: гравитация обеспечивает энергию для слияния атомов. На Земле людям приходится самим обеспечивать энергию для осуществления термоядерного синтеза. Проблема в том, что обычно на слияние атомов требуется больше энергии, чем выделяется в результате реакции. Это делает такой источник энергии неэффективным.

Говоря о том, что для запуска реакции синтеза требуется больше энергии, чем она производит, я использовал слово «обычно», потому что в декабре 2022 года Министерство энергетики США объявило, что исследователям Национальной лаборатории имени Лоуренса вLivermore, Калифорния, удалось достичь положительного энергетического выхода при термоядерной реакции. Этот эксперимент был повторен летом 2023 года. Если эти эксперименты подтвердятся, то термоядерный синтез может стать жизнеспособной формой производства энергии для будущих поколений или даже раньше.



ЗАПОМНИ

Главное преимущество синтеза перед делением заключается в продуктах реакции. Когда вы используете синтез для объединения атомов, конечным результатом является более тяжелый атом, но он сам по себе не радиоактивен. Если бы вы использовали атомы водорода, например, вы бы получили гелий. Вместо утилизации радиоактивных отходов вы бы утилизировали гелий — задача, представляющая гораздо меньший риск для окружающей среды.

Переход на солнечную энергию

В главе 3 я рассматриваю некоторые из самых ранних открытий в квантовой физике. Одним из них было объяснение Эйнштейном фотоэлектрического эффекта, при котором световая энергия вызывает

ет высвобождение электронов из определенных материалов. Сегодня эта концепция лежит в основе революционных разработок солнечных панелей для получения солнечной энергии из возобновляемого источника — солнечного света.

Конечно, людям не нужна была квантовая физика, чтобы понять, как превратить солнечную энергию в пригодную для использования. Использование солнечного света для получения энергии существовало задолго до человечества! Растения растут благодаря солнечному свету. Наш самый ранний вид топлива, древесина для сжигания, вырос благодаря солнечному свету. Древние растения и древние животные, которые ими питались, в конечном итоге умирали, оказывались погребенными и за столетия превращались в уголь и другие ископаемые виды топлива, которые люди впоследствии стали использовать в качестве источников энергии для развития нашего общества.

Но квантовое понимание материи и энергии позволило человечеству разработать и создать солнечные панели, которые пропускают все эти этапы (рост, жизнь, питание, смерть и так далее) и преобразуют солнечную энергию напрямую в электричество. Когда фотоны солнечного света сталкиваются с материалами солнечной панели, они высвобождают электроны, создавая поток электрического тока через подключенную электрическую цепь.

Глядя в будущее квантовых компьютеров

Поскольку квантовая физика говорит нам, что мир фундаментально неопределен, я не буду безрассудно пытаться предсказывать будущее с уверенностью. Но квантовая физика привела к крупным технологическим революциям за последнее столетие, и я буду немного удивлен, если она перестанет вносить свой вклад. Поэтому я бегло рассмотрю квантовые компьютеры — одно из новых направлений, которое исследуют физики и инженеры.

Вычисления с использованием суперпозиции состояний

Квантовый компьютер устроен так, что вместо обычных переключателей, которые могут быть либо включены, либо выключены, представляя биты информации в компьютерной логике, в нем используются кубиты (которые я кратко представил в главе 4). Эти кубиты представляют собой электроны или, возможно, фотоны, находящиеся в кван-

товой запутанности и суперпозиции, что означает их вероятностное представление. Вместо того чтобы точно находиться во включенном или выключенном состоянии, квантовый бит может находиться в суперпозиции, дающей ему, например, 10-процентную вероятность быть включенным и 90-процентную вероятность быть выключенным.

Как же это помогает в вычислениях? В квантовом компьютере система может производить вычисления в суперпозиции возможных состояний, что означает выполнение нескольких вычислений одновременно. На квантовом компьютере можно выполнять вычисления экспоненциально быстрее, чем сейчас на классическом компьютере!

Поддержание и развитие квантовых компьютеров

Главная проблема квантовых вычислений заключается в необходимости поддерживать систему в запутанной квантовой суперпозиции состояний, чтобы несколько состояний не коллапсировали в одно слишком рано. Это деликатный процесс, поскольку любое прямое взаимодействие с атомами или даже случайными частицами может нарушить необходимую запутанность. Тем не менее в последние годы исследователи продемонстрировали успехи с запутанными квантовыми системами, способными выполнять базовые логические операции, так что принцип концептуально подтвержден. Но они все еще исследуют эффективные способы масштабирования этих квантовых вычислительных систем, чтобы сделать их действительно полезными.

Возможности квантовых вычислений могут быть удивительными и далеко идущими, но здесь я представлю часто обсуждаемое применение: взлом шифрования. Современное шифрование в значительной степени зависит от огромных чисел, которые являются произведением двух чрезвычайно больших простых чисел. Современные компьютеры совершенно не способны найти множители этих огромных чисел (найти два простых числа), и, таким образом, шифрование остается надежным. Но квантовый компьютер сможет вычислить возможные множители за значительно меньшее количество шагов и, следовательно, сможет взломать современное обычное шифрование. К счастью, в 2022 году Национальный институт стандартов и технологий (НИСТ) при Министерстве торговли США отобрал ряд инструментов, которые станут частью пост-квантового стандарта шифрования, который сейчас находится на стадии окончательной доработки.

- » Объяснение, почему интерпретация квантовой физики необязательна
- » Описание эффекта наблюдателя
- » Исследование основных интерпретаций квантовой физики
- » Рассмотрение известных критических замечаний в адрес квантовой физики
- » Доказательство квантовой физики с помощью важных экспериментов

Глава 6

Квантовые коты и призрачное действие: интерпретации квантовой физики

Если вам когда-либо доводилось обсуждать квантовую физику на вечеринке или если вы были поклонником сериала «Теория большого взрыва», то эта глава, вероятно, та самая, которую вы так ждали. И хотя квантовая физика успешно предсказывает и определяет поведение частиц, до сих пор не утихают увлекательные споры о том, почему и как она работает.

Первые исследователи квантовой физики столкнулись с проблемой: эксперименты, которые они пытались провести, казалось, не подчинялись обычным правилам. В классической физике время проверки результатов не имеет особого значения. Неважно, проверяете ли вы результаты во время эксперимента или позже — они будут одинаковыми. Но вдруг в определенных квантовых экспериментах измерения, сделанные в разное время, стали приводить к совершенно разным результатам и поведению системы. Что же происходило?

В этой главе я рассмотрю различия в измерениях и связанных с ними интерпретациях в мире квантовой физики. Во-первых, я напому вам, что дискуссии об интерпретации результатов на самом деле не меняют сами результаты квантовой физики. Во-вторых, я объясню основные

интерпретации того, что происходит при измерении квантово-механической системы. В-третьих, я затрону некоторые из самых горячих дебатов вокруг квантовой физики, включая мысленный эксперимент с котом Шрёдингера и парадокс, предложенный Эйнштейном. Наконец, я рассмотрю эксперименты, которые помогли укрепить уверенность физиков в правильности квантовой теории, несмотря на эти парадоксы.

Вопрос о том, чему требуется интерпретация

Прежде чем погрузиться в интерпретации квантовой физики, я хочу рассмотреть несколько ключевых вопросов, лежащих в их основе. Такой подход даст мне хорошую возможность еще раз подчеркнуть некоторые из самых необычных аспектов квантовой физики.

Интерпретация вероятности и измерения

Как я обсуждал в главе 2, вероятность в классической физике отражает наше незнание результата работы системы из-за невозможности измерить все влияющие факторы. Если я бросаю шестигранный кубик, я могу сказать, что вероятность выпадения шестерки составляет одну шестую; результат является вероятностным, потому что я не могу рассчитать все физические факторы, влияющие на бросок.



ПОДСКАЗКА

Роль вероятности в квантовой физике носит более фундаментальный характер, чем в классической физике. В квантовой физике волновая функция ψ представляет вероятность того, что частица находится в определенном состоянии или положении в данный момент времени. Эта вероятность не является просто следствием недостатка информации у физика, а, скорее, кажется следствием фундаментальной квантово-физической структуры. В некотором смысле, частица не имеет определенного состояния до тех пор, пока внезапно не оказывается в нем.

Интерпретации, которые я описываю в этой главе, пытаются объяснить смысл этой квантовой вероятности и то, как она связана с процессом измерения результата.

Интерпретация эффекта наблюдателя

Одним из ключевых вопросов, который пытаются решить интерпретации квантовой физики, является *эффект наблюдателя* — факт того, что в квантовой физике процесс измерения (наблюдения) оказывает существенное влияние на результат эксперимента.



ПОДСКАЗКА

Прекрасным примером эффекта наблюдателя служит опыт с двумя щелями, который я описываю с классической точки зрения в главе 2, а затем с квантово-механической — в главе 3. Луч света (или поток частиц) сталкивается с барьером, в котором есть две щели. Когда вы не отслеживаете, через какую щель проходит свет или частицы (или световые частицы), на другой стороне (на экране, куда попадает луч света) возникает волновая интерференционная картина. Если же вы проводите измерение, чтобы отследить, через какую щель проходят частицы, вы получаете другую картину, без волновой интерференции. В последующих разделах я рассмотрю, как каждая интерпретация объясняет это странное поведение.

Эффект наблюдателя становится еще более странным: если вы поместите детектор световых частиц у щели в эксперименте с двумя щелями, но не включите его, интерференционная картина все равно сохранится. Это означает, что эффект наблюдателя нельзя полностью объяснить физическим взаимодействием частицы или фотона с детектором, поскольку детектор по-прежнему присутствует, просто ничего не регистрирует. Но как только вы включаете детектор, происходит измерение, и интерференционная картина исчезает. (Подробнее об этом феномене читайте во врезке «Сознательные наблюдатели не требуются».)

СОЗНАТЕЛЬНЫЕ НАБЛЮДАТЕЛИ НЕ ТРЕБУЮТСЯ



ТЕХНИЧЕСКИЕ
ДЕТАЛИ

Распространенной тенденцией, особенно среди не-физиков, является утверждение, что эффект наблюдателя требует наличия сознательного наблюдателя. Но нет никаких доказательств того, что это так. Ключевым фактором является взаимодействие, в результате которого извлекаются данные. Если классическая система взаимодействует с квантово-механической системой, этого, по-видимому, достаточно, чтобы вызвать эффект отсутствия интерференции. Даже если вы никогда не посмотрите на данные детектора, чтобы узнать, через какую щель прошла частица, одного факта, что что-то взаимодействовало с частицей, чтобы получить информацию, кажется, достаточно, чтобы уничтожить интерференционную картину! Сознательное знание этой информации не обязательно.

Более того, иногда эффект наблюдателя используют как доказательство существования Бога. Аргументация обычно строится следующим образом:

- Эффект наблюдателя требует наличия наблюдателя.

- Вселенная существовала до появления каких-либо наблюдателей (за возможным исключением Бога).
- Бог был бы наблюдателем всего сущего.
- Следовательно, Бог должен существовать, иначе волновая функция никогда бы не схлопнулась.

Как логический аргумент, не говоря уже о научном, эта линия рассуждений несостоятельна по нескольким причинам. Прежде всего, первый пункт аргументации отражает непонимание того, что квантовая физика говорит об эффекте наблюдателя. Волновая функция должна была схлопнуться вскоре после возникновения Вселенной – как только частицы начали взаимодействовать с множеством других частиц. (Информацию о волновых функциях см. в разделе «Обзор трех интерпретаций квантовой физики» далее в этой главе.)

Что еще важнее, даже если принять первый пункт аргументации как верный, третий пункт создает противоречие. Эффект наблюдателя говорит, что когда производится наблюдение, происходит событие А, а когда наблюдения нет – событие В. Но если третий пункт верен, то наблюдение происходит всегда. Физики всегда бы наблюдали событие А и никогда не видели бы событие В. Сам факт существования эффекта наблюдателя предполагает, что (если божество существует) оно либо не подглядывает за квантово-механическими событиями, либо такое подглядывание не считается физическим наблюдением.

Возвращаясь к запутанности

Еще одним важным элементом в интерпретациях квантовой физики и их критике является идея запутанности, которую я впервые представил в главе 1. Эта концепция утверждает, что когда части системы взаимодействуют, эти части системы становятся связанными, или запутанными, особым образом. Их состояния оказываются связанными так, что, зная состояние одной части системы, вы получаете информацию о других частях системы.

На первый взгляд, в этой ситуации нет ничего необычного. В главе 1 я привожу пример с монетками, который прекрасно объясняется в классических терминах. Но когда вы рассматриваете, как вероятность применяется в квантовой физике (где состояния остаются лишь вероятностями до момента измерения), возникает проблема. Обсуждение критики квантовой теории (в разделе «Продолжающиеся дебаты, споры и другие контраргументы» далее в этой главе) фокусируется именно на проблеме вероятности двумя разными, но важными способами — парадокс кота Шрёдингера указывает на абсурдность запутанности макроскопических объектов, а парадокс ЭПР сосредотачивается на трудности объяснения того, как может передаваться запутанность.

Открывая, что наиболее распространённая интерпретация — это пожать плечами

Прежде чем начать обсуждение глубоких вопросов интерпретации квантовой физики, я должен повторить ключевой момент: для большинства физиков, работающих в области квантовой физики, вопросы интерпретации не имеют никакого значения для их повседневной работы в этой области.

Некоторые физики-квантовики зашли так далеко, что заявляют: интерпретации — не более чем отвлечение от реальной работы в квантовой физике. Части 3 и 4 посвящены глубокому погружению в математику квантово-механических уравнений и изучению способов их практического применения.

Важно помнить две вещи:

- » Физики, которые расходятся во мнениях о концептуальном понимании квантовой механики, на самом деле не спорят о том, как решать уравнения.
- » Результаты решения уравнений дают значения, которые согласуются с растущим числом экспериментов, подтверждающих квантовую механику.



ЗАПОМНИ

В типичном курсе квантовой механики вы кратко рассматриваете концептуальные вопросы и возможные интерпретации, а затем переходите к математическим сложностям. Если вы изучаете физику для получения ученой степени, самое важное в квантовой физике — это умение решать уравнения. Дискуссия о фундаментальной природе реальности, хотя и интересна, является второстепенным вопросом.

Обзор трех интерпретаций квантовой физики

В этой главе я сосредотачиваюсь на трех основных интерпретациях квантовой физики. Физики разработали эти интерпретации, понимая, что уравнения квантовой механики работают и описывают реальное физическое поведение. Создатели этих интерпретаций стремились найти объяснения наблюдаемому физическому поведению материи и энергии, отвечая на фундаментальный вопрос: «Что происходит

физически, когда производится квантово-механическое измерение и система переходит от волны вероятностей к определенному результату?»



ЗАПОМНИ

Квантово-механическая система в один момент представлена вероятностной волновой функцией (ψ), а затем — когда производится измерение — эта вероятностная волновая функция, *похоже*, превращается в конкретное, определенное значение. Такое понимание прекрасно работает для решения уравнений и объяснения экспериментов, но неудовлетворенность им как концептуальным объяснением — причина того, почему дебаты о смысле квантовой физики продолжают спустя столетие после ее создания.

Самая популярная: копенгагенская интерпретация

Копенгагенская интерпретация получила свое название потому, что ее активно отстаивали Нильс Бор и его Копенгагенский институт. Это также первая прочно утвердившаяся интерпретация квантовой физики. Согласно этой интерпретации квантовой физики, в момент измерения волновая функция *коллапсирует*, принимая определенное значение. Именно акт измерения вызывает этот коллапс.

Рассмотрим эффект наблюдателя в двухщелевом эксперименте (описание приведено в разделе «Интерпретация эффекта наблюдателя» ранее в этой главе). Следующие утверждения обобщают, как копенгагенская интерпретация объясняет происходящее во время эксперимента.

- » При измерении у щели: Волновая функция коллапсирует у щели *до* того, как может произойти интерференция. Определенная частица движется от щели к экрану. Интерференционная картина не возникает.
- » При измерении на экране: Волновая функция проходит через обе щели, в результате чего образуются две волновые функции. Эти волновые функции интерферируют друг с другом, а затем коллапсируют на экране, показывая интерференционную картину.

Проблема такого подхода в том, что он просто описывает коллапс волновой функции как происходящее событие, не давая реального физического описания процесса. Почему акт измерения вызывает коллапс волновой функции? Физики не знают. Согласно копенгагенской интерпретации, это просто происходит, и все. Для тех, кто придерживается этой интерпретации, такого объяснения достаточно.

Занимательная интерпретация: многомировая интерпретация

Согласно *многомировой интерпретации*, существует неисчислимо много вселенных, и каждая представляет одну из возможных ветвей квантовой вероятности. Когда происходит измерение, реализуются все возможные исходы события, но в разных версиях вселенной (или разных «мирах»). Вы видите только один из этих исходов, потому что «Вы», наблюдающий результат измерения, находитесь только в одном из миров. Где-то — в другой версии вселенной — другая версия Вас наблюдает другие возможные исходы.



ВНИМА-
НИЕ

Несомненно, это звучит как научная фантастика, отчасти потому, что многие научно-фантастические произведения основаны именно на этой идее. Обычно в таких историях кто-то устанавливает контакт с другим миром, представляющим одну из альтернативных вероятностных ветвей. Но не дайте себя обмануть. В рамках многомировой интерпретации квантовой физики такой научно-фантастический сценарий полностью невозможен. Согласно этой интерпретации, после того как происходит ветвление, разделившиеся миры никогда не воссоединятся и не будут взаимодействовать. Они продолжают изменяться и развиваться совершенно независимо друг от друга.

Американский физик Хью Эверетт III в 1957 году предложил многомировую интерпретацию. Ее целью было серьезно отнестись к множественным исходам волновой функции. В самом буквальном смысле, согласно этой интерпретации, волновая функция никогда не коллапсирует. Волновая функция всей Вселенной продолжает эволюционировать и наращивать суперпозицию состояний, добавляя все новые возможные состояния Вселенной при каждом квантовом событии. Наблюдатели не видят множественные исходы, потому что они наблюдают результат только для одного состояния Вселенной — того, в котором они сейчас находятся. Наблюдение определенного исхода выглядит так, будто происходит коллапс волновой функции.

Преимущество этой интерпретации в том, что она устраняет необходимость объяснять коллапс волновой функции, но ее недостаток, вероятно, очевиден: приходится допускать существование несметного количества других миров, которые полностью недоступны для нас. Это довольно высокая цена.

Ответственный подход: Скрытые параметры

Другой подход к объяснению квантовой механики, имеющий определенное число сторонников, известен как *интерпретация скрытых параметров*. Ее также иногда называют интерпретацией де Бройля-

Боме — по концепции, изначально предложенной Луи де Бройлем и затем развитой Дэвидом Бомом. Большинство физиков хотели бы, чтобы эта интерпретация оказалась верной, но, вероятно, это не так.

Интерпретация скрытых параметров разрешает проблемы вероятности и неопределенности в квантовой физике, утверждая, что, как и в классической физике, эти проблемы — всего лишь мера человеческого незнания. Согласно этой интерпретации, некая сила управляет квантовыми процессами, но физики и исследователи просто не знают, как ее обнаружить или полностью учесть. В первоначальной концепции де Бройля эта сила называлась волной-пилотом, хотя в более поздних работах Боме она упоминается как квантовый потенциал.



ПОДСКАЗКА

Чтобы согласовываться с результатами квантовых экспериментов, этот предполагаемый квантовый потенциал должен быть нелокальным. То есть он должен содержать информацию обо всех других частицах, с которыми конкретная частица запутана — включая любую частицу, с которой она когда-либо взаимодействовала — и эта информация должна быть доступна мгновенно.

Преимущество этой интерпретации в том, что она возвращает логическую согласованность и детерминизм в квантовую Вселенную, поскольку вероятность и неопределенность исчезают. Недостаток в том, что этот подход просто постулирует существование логической согласованности и детерминизма в форме полностью необнаруженного гипотетического квантового потенциала. Этот потенциал не только не обнаружен, но и должен был бы отражать все, что есть во Вселенной, чтобы функционировать. В этом случае вы фактически получаете волновую функцию, представляющую всю Вселенную. И из-за этой непостижимой сложности данный подход не принимается многими физиками.

Непрекращающиеся дебаты и споры

Большинство дискуссий о квантовой физике сосредоточено вокруг копенгагенской интерпретации (о которой говорилось в разделе «Популярная версия: копенгагенская интерпретация» ранее в этой главе), поскольку исторически она была наиболее широко принятой интерпретацией. Согласно этой интерпретации, вероятностная волновая функция коллапсирует при проведении измерения и переходит от общего описания вероятности нахождения частиц в различных состояниях к конкретному результату, где частица находится в определенном состоянии. Самая известная критика такого подхода исходила от двух важнейших физиков XX века: Эрвина Шрёдингера и Альберта Эйнштейна. Оба предложили мысленные эксперименты, призванные доказать абсурдность копенгагенской интерпретации.

Обсуждаем (мертвого?) кота в комнате

Эрвин Шрёдингер предложил свой знаменитый мысленный эксперимент с котом в 1935 году. *Примечание:* Ни один настоящий кот не пострадал при создании этого мысленного эксперимента!

Копенгагенская интерпретация утверждает, что волновая функция коллапсирует в конечное состояние при проведении измерения. Так, если у вас есть радиоактивный изотоп с 50-процентной вероятностью распада в течение следующего часа, помещенный в запечатанную коробку, то согласно этой интерпретации волновая функция изотопа существует в состоянии суперпозиции — одновременно распавшегося и нераспавшегося состояния — до момента измерения.



ПОДСКАЗКА

Это принципиально важно: дело не просто в том, что физик не знает, распался ли изотоп, а в том, что согласно копенгагенской интерпретации состояние изотопа действительно не определено до тех пор, пока коробка не будет открыта и измерение не будет произведено. Считается, что изотоп находится в квантовой суперпозиции вероятностей — где он одновременно распался и не распался — пока коробка не будет открыта и не произойдет коллапс волновой функции.

Шрёдингер считал это полной бессмыслицей и предложил сценарий, чтобы это доказать. Предположим, у вас есть точно такая же коробка, но теперь в ней находится устройство, подключенное к счетчику Гейгера. Когда радиоактивный изотоп распадается, он запускает счетчик Гейгера, который затем активирует устройство, разбивающее ампулу с ядовитым газом. И да, в коробке также находится кот, так что если изотоп распадется, кот мгновенно погибнет. (Еще раз напомним, что Шрёдингер предлагал это только как мысленный эксперимент.)

Согласно копенгагенской интерпретации квантовой физики, до момента открытия коробки изотоп находится в состоянии суперпозиции — он одновременно распался и не распался, что означает, что кот находится в состоянии, где его волновая функция существует в суперпозиции живого и мертвого состояний. Но как только коробка открывается, производится измерение (вы можете заглянуть внутрь), и волновая функция коллапсирует в состояние, где кот либо жив, либо мертв.

С физической точки зрения, объяснение эксперимента отмечает, что измерение происходит в момент распада изотопа. Счетчик Гейгера, устройство, ампула с ядовитым газом и кот мгновенно реагируют соответствующим образом на основе этого измерения. С другой стороны, если изотоп не распадается, счетчик Гейгера также это «знает», остается неактивным, и кот, соответственно, остается живым. Таким образом, мысленный эксперимент абсурден именно потому,

что квантовая система взаимодействует с классической системой внутри ящика, поэтому коллапс в этом случае фактически происходит задолго до того, как ящик открывают.

Хотя мысленный эксперимент с котом Шрёдингера в итоге не смог показать абсурдность копенгагенской интерпретации, он стал полезным способом:

- » Подчеркнуть логические несоответствия квантового мира при его расширении до макроскопического уровня.
- » Указать на существование границы применимости квантовой логики. Где-то между распадом частицы и смертью кота человеческая интуиция подсказывает, что должна существовать граница, где квантовая логика перестает работать. К сожалению, физики не могут точно определить, где именно проходит эта граница.

Другие интерпретации квантовой физики рассматривают этот мысленный эксперимент иначе, чем копенгагенская интерпретация:

- » Согласно многомировой интерпретации, вселенная расщепляется на множество вселенных. В некоторых из этих вселенных кот будет жив, а в некоторых – мертв. Вы просто не знаете, в какой именно вселенной находитесь, пока не проведете измерение.
- » В интерпретации скрытых параметров некая необнаруженная квантовая сила управляет коллапсом волновой функции и определяет, выживет ли кот или умрет. Но наблюдатели эксперимента не знают, что это за сила, и не могут ее измерить, а вероятность является лишь следствием этого незнания.

Эйнштейн и жуткое действие на расстоянии

Один из концептуально тревожных аспектов квантово-механической волновой функции — это идея о том, что две частицы могут стать запутанными. По сути, всякий раз, когда происходит взаимодействие, которое может определить или изменить состояние частицы, возникает возможность того, что вовлеченные частицы станут запутанными друг с другом. Эта особенность квантовой физики привела к одной из самых формальных критик квантовой механики со стороны Эйнштейна.

Эйнштейн вместе с Борисом Подольским и Натаном Розеном сформулировал свою критику в 1935 году (в тот же год, когда появился

мысленный эксперимент с котом Шрёдингера). Эта критика стала известна как парадокс Эйнштейна-Подольского-Розена, или ЭПР-парадокс, хотя в основном его написал Подольский. Более простая и популярная версия ЭПР-парадокса была предложена Дэвидом Бомом (автором интерпретации скрытых параметров) в 1951 году, поэтому именно эту версию я описываю в данном разделе.

Установка предположений и связь теорий

Представьте эксперимент, в котором испускается пара электрон-позитрон. Эти две частицы создаются таким образом, что они оказываются запутанными друг с другом. Если вы измеряете одну и определяете ее как электрон, то мгновенно узнаете, что противоположная частица является позитроном, и наоборот. Частицы в этом мысленном эксперименте проходят следующие этапы:

1. Электрон и позитрон создаются и разлетаются в разных направлениях к детекторам (А и Б), установленным на большом расстоянии.

2. Когда частица достигает своего детектора, она измеряется (идентифицируется) как электрон или позитрон.

У каждого детектора есть 50-процентная вероятность обнаружить электрон и также 50-процентная вероятность обнаружить позитрон.

3. Согласно копенгагенской интерпретации, как только один детектор измеряет (идентифицирует) свою частицу, волновая функция коллапсирует в согласованное состояние.

Если детектор А измеряет электрон, то детектор Б всегда будет измерять позитрон.



ЗАПОМНИ

Противоречивая часть парадокса ЭПР заключается в согласовании пунктов 2 и 3 из приведенного списка: как информация от идентифицированного состояния частицы у детектора А успевает достичь детектора Б достаточно быстро, чтобы вызвать мгновенный коллапс?

Эта проблема согласования мгновенного коллапса возникает из теории относительности Эйнштейна, которая имеет важное следствие: скорость света, по-видимому, является предельной скоростью передачи информации. Как в сценарии парадокса ЭПР квантовое сообщение передается от частицы у детектора А к частице у детектора Б мгновенно? Кажется, что эта установка приводит к обмену какой-то информацией между частицами со скоростью, превышающей ско-

рость света. Эйнштейн называл такое поведение «жутким действием на расстоянии», и это было одним из тех аспектов квантовой физики, которые постоянно его беспокоили.

В поисках полной интерпретации

Цель парадокса ЭПР не состояла в том, чтобы опровергнуть квантовую физику. Она, очевидно, работает, и ничто в мысленном эксперименте не подразумевает обратного. Однако критика предполагает, что интерпретации квантовой физики кажутся неполным описанием реальности. Эйнштейн (и многие другие) искали полное описание реальности. (Подробнее об этих поисках читайте в главе 5.)

Как вы узнаете в следующем разделе, эксперименты подтвердили правоту квантовой физики относительно того, что происходит в сценарии парадокса ЭПР. Измерение одной из этих частиц действительно мгновенно влияет на другую частицу. Эти две запутанные частицы определенно демонстрируют нелокальную связь друг с другом.



ВНИМАНИЕ

Эксперименты, демонстрирующие мгновенное взаимодействие между измеряемыми частицами, не обязательно означают, что между ними передается какой-либо сигнал. В конце концов, частицы запутаны, а значит, волновая функция, описывающая их, находится в двух состояниях. Либо это «электрон у детектора А, позитрон у детектора Б», либо «позитрон у детектора А, электрон у детектора Б». Измерение, сделанное на любом из детекторов, достаточно для коллапса волновой функции в правильное состояние. Согласно современному пониманию копенгагенской интерпретации, предположение о необходимости передачи информации через пространство является ошибочным.

Изучая запутанные эксперименты

Пока продолжались дебаты вокруг квантовой физики, ученые искали способы проверить различные интерпретации. Вопросы о запутанности в мысленных экспериментах с котом Шрёдингера и парадоксом ЭПР задумывались как теоретические, но физики также хотели найти способ проверить запутанность в реальном мире.

Неравенство Белла

В 1964 году ирландский физик Джон Белл взял годовой отпуск от своей обычной работы. Чем он занялся? Он разработал способ проверки парадокса ЭПР. Чем еще можно заниматься в отпуске?

Белл начал свое исследование со следующих мыслей и предположений:

- » Белл рассмотрел, что означало бы, если бы копенгагенская интерпретация была неверна и вместо этого некая скрытая переменная определяла результаты измерений.
- » Чтобы сохранить теорию относительности, Белл принял, что понимание Эйнштейном скорости света верно. Следовательно, любые скрытые переменные должны были бы передавать информацию со скоростью меньше скорости света и не проявлять нелокальность (подробнее о нелокальности см. раздел «Ответственный подход: скрытые параметры» ранее в этой главе). Это были бы локальные скрытые переменные.
- » Белл предложил эксперимент с двумя запутанными частицами, имеющими противоположные спины. У одной частицы спин был направлен вверх, у другой – вниз. Экспериментальная установка с магнитами Штерна-Герлаха может обнаружить этот спин (как описано в главе 11).

Белл показал, что для определенных конфигураций этих двух наборов магнитов вероятностная копенгагенская интерпретация и интерпретация локальных скрытых переменных давали разные результаты. Математическое соотношение, описывающее ожидаемый результат с локальными скрытыми переменными, называется *неравенством Белла*. В стандартном вероятностном подходе, соответствующем копенгагенской интерпретации, результаты *нарушали* неравенство Белла.

Замечательно, что такой результат дает экспериментальным физикам поле для деятельности. Перед вами фундаментальная концепция, которую наконец-то можно проверить! В конце концов, Белл уже проделал всю сложную математическую работу. Когда же физики смогли проверить эти концепции на практике?

Великий эксперимент Алена Аспе

Французский физик Ален Аспе наконец смог проверить неравенство Белла в 1981 году, опираясь на работу американского физика Джона Клаузера, проведенную в 1972 году. Эксперименты Клаузера показали нарушение неравенства Белла, но его оборудование и экспериментальная установка не были достаточно совершенными для получения окончательных выводов. Физики смогли найти возможные недостатки в эксперименте 1972 года. Потребовалось еще десятилетие технологического и экспериментального прогресса, чтобы создать эксперимент, который убедил бы всех.

Одним из опасений было то, что локальные скрытые переменные каким-то образом были связаны с конкретной конфигурацией эксперимента. Другими словами, частицы по сути «знали» (через локальные скрытые переменные), куда они направляются, и могли ориентироваться соответственно. Чтобы избежать этой проблемы, Аспе разработал несколько хитроумных приемов, позволяющих менять траекторию и детекторы в процессе эксперимента.



ЗАПОМНИ

Когда Аспе провел и опубликовал результаты своих экспериментов, итог был весьма убедительным: неравенство Белла было нарушено. В квантовой физике не оставалось места для локальных скрытых переменных. Вероятностная интерпретация квантовой физики выдержала свою самую прямую экспериментальную проверку.

Спустя сорок лет после публикации результатов Аспе он и Клаузер разделили Нобелевскую премию по физике 2022 года за свои исследования (вместе с австрийским физиком Антоном Цайлингером, который также провел новаторские исследования запутанных частиц — ключевого элемента исследований квантовых компьютеров, обсуждаемых в главе 5). Джон Белл, также внесший вклад в эту работу, умер от кровоизлияния в мозг в 1990 году, а Нобелевская премия не присуждается посмертно. Тем не менее признание, которое получили Аспе и Клаузер за это удивительное экспериментальное достижение, также свидетельствует о признании того, насколько важным был вклад Белла в фундаментальное понимание квантовой физики.



**В ЧИСЛАХ:
ОСНОВЫ
МАТЕМАТИКИ
КВАНТОВОЙ
ФИЗИКИ**

В ЭТОЙ ЧАСТИ...

Познакомьтесь с написанием уравнений для волновых функций в квантовой физике.

Найдите волновые функции для частиц в различных энергетических ямах.

Найдите волновые функции для квантовых гармонических осцилляторов.

Примените квантовую физику к угловому моменту.

Углубитесь в математику квантового спина частиц.

- » Создание векторов состояния
- » Использование обозначений Дирака для векторов состояния
- » Работа с бра- и кет-векторами
- » Понимание матричной механики
- » Переходим к волновой механике

Глава 7

Погружение в матрицы: Знакомство с векторами состояния

Квантовая физика — это не только эксперименты с ускорителем частиц, где нужно стараться не уничтожить Вселенную. Иногда приходится заниматься более приземленными вещами, такими как включение и выключение света, немного вычислений или игра в кости. Если вы действительно исследуете аспекты физики с помощью костей, директор лаборатории даже не будет сердиться на вас. Вы можете собрать значения вероятностей в вектор (матрицу-столбец) в *гильбертовом пространстве* (тип бесконечномерного векторного пространства с некоторыми свойствами, особенно ценными в квантовой физике).

Большая часть этой главы основывается на базовых знаниях линейной алгебры и векторов, хотя подход к векторам может сильно отличаться от того, с чем вы сталкивались ранее. Если вы не очень уверенно владеете теорией векторов, имеет смысл сделать небольшой перерыв и обратиться к книге «Линейная алгебра для чайников», прежде чем погружаться в эту главу.

В этой главе рассматривается, как в квантовой физике работают с вероятностями, начиная с представления различных возможных состояний частицы в виде вектора — вектора вероятностных состояний. Далее я помогу вам освоиться с некоторыми математическими обозначениями, часто используемыми в квантовой физике, включая бра, кет, матрицы и волновые функции. По ходу изложения вы также познакомитесь с некоторыми важными операторами.

Создание своих собственных векторов в гильбертовом пространстве

Предположим, вы экспериментируете с броском пары игральных костей и пытаетесь определить *относительную вероятность* (степень уверенности в появлении определенного результата) выпадения различных значений. (Можете заглянуть в главу 2, где я рассматриваю классическую теорию вероятностей.) Вы составляете список, показывающий относительную вероятность выпадения 2, 3, 4 и так далее до 12. Таблица этих относительных вероятностей выглядит следующим образом:

Сумма на костях	Относительная вероятность (количество способов получить определенную сумму)
2	1
3	2
4	3
5	4
6	5
7	6
8	5
9	4
10	3
11	2
12	1

Таблица показывает, что вероятность выбросить 3 в два раза выше, чем выбросить 2, вероятность выбросить 5 в четыре раза выше, чем выбросить 2, и так далее. Эти относительные вероятности можно объединить в вектор (если вы думаете о традиционном «векторе» из физики, представьте его как столбец компонентов, а не как величину и направление), чтобы легко отслеживать их. Вектор записывается следующим образом:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 5 \\ 4 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Теперь вы приближаетесь к тому, как работает квантовая физика. У вас есть вектор вероятностей того, что кости будут находиться в различных состояниях (то есть иметь определенные значения). Однако квантовая физика имеет дело не непосредственно с вероятностями, а с амплитудами вероятностей, которые являются квадратными корнями из вероятностей. Чтобы найти фактическую вероятность того, что частица (в данном случае кости) будет находиться в определенном состоянии, вы складываете волновые функции — которые будут представлены этими векторами, — а затем возводите модуль их суммы (см. обсуждение в главе 3). Поэтому вы извлекаете квадратный корень из всех этих значений, чтобы получить амплитуды вероятностей:

$$\begin{bmatrix} \sqrt{1} \\ \sqrt{2} \\ \sqrt{3} \\ \sqrt{4} \\ \sqrt{5} \\ \sqrt{6} \\ \sqrt{5} \\ \sqrt{4} \\ \sqrt{3} \\ \sqrt{2} \\ \sqrt{1} \end{bmatrix}$$

Вектор квадратных корней лучше представляет общую вероятность, и сумма квадратов модулей всех этих значений должна давать общую вероятность, равную 1 (поскольку один из этих результатов обяза-

тельно произойдет). В текущем виде сумма квадратов этих чисел равна 36, поэтому нужно разделить каждое значение на $\sqrt{36}$, или 6, и вектор теперь выглядит так:

$$\begin{bmatrix} \sqrt{1/36} \\ \sqrt{2/36} \\ \sqrt{3/36} \\ \sqrt{4/36} \\ \sqrt{5/36} \\ \sqrt{6/36} \\ \sqrt{5/36} \\ \sqrt{4/36} \\ \sqrt{3/36} \\ \sqrt{2/36} \\ \sqrt{1/36} \end{bmatrix}$$

Теперь вы можете получить амплитуду вероятности выбросить любую комбинацию от 2 до 12, читая вектор сверху вниз; амплитуда вероятности выбросить 2 равна $\frac{1}{6}$, выбросить 3 равна $\frac{\sqrt{2}}{6}$, и так далее.

Упрощая жизнь с обозначениями Дирака

Этот новый вектор состояния (см. предыдущий раздел) можно представить как вектор в пространстве игральные кости — пространстве всех возможных состояний пары костей, которое является 11-мерным.

Однако в большинстве задач квантовой физики векторы могут быть бесконечно большими — например, движущаяся частица может находиться в бесконечном числе состояний. Работать с большими массивами состояний в векторной записи непросто, поэтому вместо того, чтобы каждый раз выписывать весь вектор целиком, в квантовой физике обычно используется обозначение, разработанное физиком Полем Дираком — так называемые *обозначения Дирака*, или *бра-кет нотация*.

Я объясню значение этих терминов чуть позже, но сейчас вы, вероятно, думаете: «А как это произносится?» Чтобы не томить вас, скажу, что произносится это так же, как пишется. «Бра» (да, как предмет нижнего белья) рифмуется с «ра». «Кет» рифмуется со словом «нет». Так что если при произнесении «бра-кет» у вас получается что-то

похожее на слово «ракет», начинающееся с «б», вы довольно близки к истине. (Google сообщает мне, что в британском английском существует около 112 вариантов произношения фамилии Дирак, так что эта интрига пусть останется).

Сокращение векторов состояния в виде кет

В нотации Дирака вектор состояния сокращенно записывается как кет — вектор, использующий такое обозначение: $|\rangle$. Таким образом, в примере с игральными костями из предыдущего раздела вектор состояния можно записать в виде кета следующим образом:

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 1/6 \\ \sqrt{2}/6 \\ \sqrt{3}/6 \\ 2/6 \\ \sqrt{5}/6 \\ \sqrt{6}/6 \\ \sqrt{5}/6 \\ 2/6 \\ \sqrt{3}/6 \\ \sqrt{2}/6 \\ 1/6 \end{bmatrix}$$

Здесь компоненты вектора состояния представлены числами в 11-мерном пространстве игровых костей. Однако чаще каждая компонента представляет собой функцию положения x и времени t . Но этот вектор пока не представляет ничего настолько сложного. Маленькими шажками. Квантовыми маленькими шажками.



ТЕХНИЧЕСКИЕ
ДЕТАЛИ

ОСНОВЫ ВЕКТОРНОЙ АЛГЕБРЫ

Подумайте на минуту о векторах в трехмерном пространстве. Эти векторы имеют три координаты, соответствующие трем пространственным осям: x , y и z . Каждую из этих трех осей можно рассматривать как отдельный вектор: x -вектор, y -вектор и z -вектор. x -вектор нельзя записать как линейную комбинацию y -векторов и z -векторов. Три осевых вектора являются *линейно независимыми* друг от друга.

Аналогично, набор векторов в гильбертовом пространстве называется *линейно независимым*, если ни один из векторов нельзя представить в виде линейной комбинации остальных. Такие линейно независимые векторы можно рассматривать как независимые оси и использовать для формирования допустимого базиса в гильбертовом пространстве. Другими словами, любой вектор состояния можно будет записать как линейную комбинацию этих базисных векторов – точно так же, как трехмерный вектор можно представить в виде линейной комбинации векторов по осям x , y и z .

Одно из преимуществ бра-кет обозначений заключается в том, что они избавляют от необходимости определять полный базис, как описано в разделе «Охватывая все базисы: бра и кет как безбазисные векторы состояния» далее в этой главе.

Запись эрмитова сопряжения в виде бра

Каждому кет-вектору соответствует бра-вектор. (Термины происходят от слова bracket (скобка), что я объясняю в разделе «В ритме с операторами» далее в этой главе.) Бра-вектор является эрмитовым сопряжением соответствующего кет-вектора. Чтобы его найти, нужно взять исходный кет-вектор, транспонировать его и затем взять комплексное сопряжение. *Комплексное сопряжение* меняет знак, соединяющий действительную и мнимую части комплексного числа. Но в случае кет-вектора для пространства игровых костей все значения являются действительными числами, поэтому соответствующий бра-вектор представляет собой следующий вектор-строку:

$$\langle \psi | = \left[\frac{1}{6} \frac{\sqrt{2}}{6} \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{2}{6} \frac{\sqrt{5}}{6} \frac{\sqrt{6}}{6} \frac{\sqrt{5}}{6} \frac{2}{6} \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{\sqrt{2}}{6} \frac{1}{6} \right]$$



ЗАПОМНИ

Заметим, что если какие-либо элементы кет-вектора являются комплексными числами, при создании соответствующего бра-вектора нужно брать их комплексные сопряжения. Например, если комплексное число в кет-векторе имеет вид $a + bi$ (где bi — чисто мнимое), его комплексное сопряжение меняет знак мнимой части так, что в бра-векторе оно становится $a - bi$, и наоборот.

Умножение бра и кет: Вероятность, равная 1

Вы можете взять бра и кет и объединить их вместе, что означает их перемножение, вот так:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \begin{bmatrix} \frac{1}{6} & \frac{\sqrt{2}}{6} & \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{2}{6} & \frac{\sqrt{5}}{6} & \frac{\sqrt{6}}{6} & \frac{\sqrt{5}}{6} & \frac{2}{6} & \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{\sqrt{2}}{6} & \frac{1}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{\sqrt{2}}{6} \\ \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{2}{6} \\ \frac{\sqrt{5}}{6} \\ \frac{\sqrt{6}}{6} \\ \frac{\sqrt{5}}{6} \\ \frac{2}{6} \\ \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{\sqrt{2}}{6} \\ \frac{1}{6} \end{bmatrix}$$

Это вычисление представляет собой просто матричное умножение, и результат такой же, как если бы мы взяли сумму квадратов элементов:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \left[\frac{1}{36} + \frac{2}{36} + \frac{3}{36} + \frac{4}{36} + \frac{5}{36} + \frac{6}{36} + \frac{5}{36} + \frac{4}{36} + \frac{3}{36} + \frac{2}{36} + \frac{1}{36} \right] = 1$$

Такой результат получается потому, что полная вероятность должна равняться 1. Следовательно, в общем случае произведение соответствующих бра и кет равно 1:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

Если это соотношение выполняется и дает значение 1, то вектор нормирован.

Охватывая все базисы: бра и кет как безбазисные векторы состояния

Причина популярности кет-нотации, $|\psi\rangle$, в квантовой физике заключается в том, что она позволяет работать с векторами состояния *без привязки к конкретному базису*. Другими словами, вы не ограничены координатным базисом, базисом импульсов или энергетическим базисом. Это полезно, поскольку большая часть работы в квантовой физике происходит в абстрактных вычислениях, и вам не захочется тащить через эти вычисления все компоненты векторов состояния. Часто это невозможно, потому что в рассматриваемой задаче может существовать бесконечное количество возможных состояний.

Например, предположим, что вы представляете свои состояния:

- » Используя векторы положения в трехмерном гильбертовом пространстве. В этом случае у вас есть оси x , y и z , образующие базис положения для вашего пространства. Это нормально, но не все ваши вычисления должны выполняться с использованием этого базиса положения. Поскольку положение является стандартным способом описания трехмерного пространства, вам редко нужно специальное название для этого, но если бы вы хотели быть точными, его называли бы координатным пространством.
- » Используя векторы импульса в трехмерном пространстве с тремя осями в гильбертовом пространстве: p_x , p_y и p_z . Чтобы использовать этот импульсный базис, вам пришлось бы преобразовать все ваши векторы положения в векторы импульса, корректируя каждую компоненту и отслеживая, что происходит с каждой компонентой во всех ваших вычислениях. Трехмерное пространство, определенное векторами импульса с использованием импульсного базиса, называется пространством импульсов (чтобы отличать его от координатного пространства).



ПОДСКАЗКА

Здесь на помощь приходит бра-кет обозначение Дирака — вы используете его для выполнения всех математических операций, а затем при необходимости подставляете различные компоненты ваших векторов состояния в конце. То есть вы можете выполнять вычисления в чисто символьном виде, не привязываясь к конкретному базису.

И когда вам нужно работать с компонентами кет-вектора, например, когда вы хотите получить физические ответы, вы также можете преобразовать кет-векторы в другой базис. В общем случае, когда у вас есть вектор $|\psi\rangle$, вы можете выразить его как сумму по N базисным векторам $|\phi_i\rangle$ следующим образом:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N |\phi_i\rangle \langle \phi_i | \psi \rangle$$

где N — размерность гильбертова пространства, а i — целое число, нумерующее базисные векторы.

Понимание некоторых соотношений с помощью кет-векторов

Кет-обозначение упрощает математику по сравнению с матричной формой, поскольку вы можете использовать несколько математических соотношений. Например, вот так называемое *неравенство Шварца* для векторов состояния:

$$|\langle \psi | \phi \rangle|^2 \leq \langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle$$

Это неравенство говорит, что квадрат модуля (что по сути эквивалентно абсолютному значению, но когда речь идет о векторах) произведения двух векторов состояния меньше или равен произведению квадратов модулей каждого из векторов. Это оказывается другим способом записи векторного неравенства:

$$|A \cdot B|^2 \leq |A|^2 |B|^2$$



ЗАПОМНИ

Почему неравенство Шварца так полезно? Вы можете использовать неравенство Шварца для вывода принципа неопределенности Гейзенберга (представленного в главе 3). И этот принцип является одной из центральных концепций в квантовой физике, поскольку он количественно определяет соотношение между положением и импульсом. Я вывожу его в разделе «Начиная с нуля и заканчивая Гейзенбергом» позже в этой главе.

Другие соотношения между кет-векторами также могут упростить ваши вычисления. Например, два кет-вектора $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ называются ортогональными, если

$$\langle \psi | \phi \rangle = 0$$



ПОДСКАЗКА

Трехмерные векторы *ортогональны*, если они перпендикулярны друг другу. Это также означает, что они *линейно независимы*. Вы можете распространить эти концепции ортогональности и линейной независимости на более высокие размерности, но метафора с перпендикулярностью помогает думать о соотношениях между этими векторами.

Два кета (кет-вектора) считаются *ортонормированными*, если они ортогональны друг другу и каждый из них *нормирован* (дает значение 1). Другими словами, они должны удовлетворять следующим условиям:

- » $\langle \psi | \phi \rangle = 0$
- » $\langle \psi | \psi \rangle = 1$
- » $\langle \phi | \phi \rangle = 1$

Примечание: Запомните эти соотношения с кетами, они пригодятся при работе с операторами, о которых речь пойдет в следующем разделе.

Знакомство с операторами

Что насчет всех вычислений, которые вы должны уметь выполнять с кетами? Произведение бра и кет это хорошо, но что, если вы хотите извлечь из вычислений некоторые физические величины, которые можно измерить? Вот тут-то и появляются операторы.

Здравствуйте, оператор: Как работают операторы

Вот общее определение оператора (в данном случае A) в квантовой физике: оператор — это математическое правило, которое при действии на $|\psi\rangle$ преобразует его в новый кет в том же пространстве. (Этот новый кет может быть просто старым кетом, умноженным на *скаляр* — величину, имеющую только значение, но не направление). Таким образом, когда у вас есть оператор A , он преобразует кеты и бра следующим образом:

$$A|\psi\rangle = |\psi'\rangle$$
$$\langle\psi|A^\dagger = \langle\psi'|$$



ЗАПОМНИ

Вот несколько примеров операторов, которые вы встретите в квантовомеханических вычислениях:

- » **Гамильтониан (H):** Применение оператора Гамильтона (который выглядит по-разному для каждой физической ситуации) дает E — энергию частицы, представленной кетом. E является скалярной величиной:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

- » **Единичный оператор (I):** Единичный оператор оставляет кеты без изменений:

$$I|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

- » **Градиент (∇):** Оператор градиента (впервые введенный в главе 2) использует *производные* (скорости изменения функции относительно различных пространственных переменных) и работает следующим образом:

$$\nabla|\psi\rangle = \frac{\partial}{\partial x}|\psi\rangle i + \frac{\partial}{\partial y}|\psi\rangle j + \frac{\partial}{\partial z}|\psi\rangle k$$

- » **Импульс (P):** В квантовой механике оператор импульса выглядит так и используется для нахождения линейного импульса: $P|\psi\rangle = -i\hbar\nabla|\psi\rangle$

» **Лапласиан (∇^2):** Оператор Лапласа, который похож на градиент второго порядка, используется для создания оператора Гамильтона, определяющего энергию:

$$\nabla^2 |\psi\rangle = \nabla \cdot \nabla |\psi\rangle = \frac{\partial^2}{\partial x^2} |\psi\rangle + \frac{\partial^2}{\partial y^2} |\psi\rangle + \frac{\partial^2}{\partial z^2} |\psi\rangle$$



ВНИМАНИЕ

В общем случае умножение операторов не является коммутативным (то есть не подчиняется переместительному свойству, как в арифметике), поэтому для операторов A и B: $AB \neq BA$.

Я этого ожидал: Нахождение средних значений

Поскольку в квантовой физике все выражается через вероятности, предсказания становятся очень важными. И самым важным таким предсказанием является среднее значение. *Среднее значение* оператора — это среднее значение, которое вы получите, если проведете измерение физической величины, которой соответствует данный оператор много раз. Например, среднее значение оператора Гамильтона (см. предыдущий раздел) — это средняя энергия изучаемой системы.



ЗАПОМНИ

Среднее значение — это взвешенное среднее вероятностей нахождения системы в различных возможных состояниях. Вот как найти среднее значение оператора A:

$$\text{Среднее значение} = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

Заметьте, что поскольку $\langle \psi |$ можно представить как вектор-строку, а $|\psi\rangle$ как вектор-столбец, оператор A можно представить в виде квадратной матрицы.

Например, предположим, что вы работаете с парой игральные кости и вероятностями всех возможных сумм (см. предыдущий раздел «Создание собственных векторов в гильбертовом пространстве»). В этом примере с костями среднее значение представляет собой сумму слагаемых, где каждое слагаемое — это значение, выпадающее на костях при броске, умноженное на вероятность появления этого значения.

Бра и кет будут отвечать за вероятности, поэтому созданному вами оператору — назовем его оператором броска R — нужно хранить значения костей (от 2 до 12) для каждой вероятности. Таким образом, оператор R выглядит следующим образом:

$$R = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 11 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 & 0 \end{bmatrix}$$

Итак, чтобы найти среднее значение R , нужно вычислить $\langle \psi | R | \psi \rangle$. Если расписать это в терминах компонент, получим:

$$\langle \psi | R | \psi \rangle = \begin{bmatrix} \frac{1}{6} & \frac{\sqrt{2}}{6} & \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{2}{6} & \frac{\sqrt{5}}{6} & \frac{\sqrt{6}}{6} & \frac{\sqrt{5}}{6} & \frac{2}{6} & \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{\sqrt{2}}{6} & \frac{1}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 11 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/6 \\ \sqrt{2}/6 \\ \sqrt{3}/6 \\ 2/6 \\ \sqrt{5}/6 \\ \sqrt{6}/6 \\ \sqrt{5}/6 \\ 2/6 \\ \sqrt{3}/6 \\ \sqrt{2}/6 \\ 1/6 \end{bmatrix}$$

Выполнив вычисления, получаем:

$$\langle \psi | R | \psi \rangle = 7$$

Таким образом, среднее значение броска костей равно 7. К счастью, это совпадает с более традиционным способом вычисления ожидаемого значения для броска двух костей в теории вероятностей (я рассматриваю более классический подход в главе 2). Любой, кто играл в кости в крэпс или в настольную игру «Колонизаторы», знает, какое разочарование может вызвать это ожидаемое значение на двух костях.

Теперь вы можете видеть, откуда взялись термины бра и кет — они «закрывают в скобки» оператор для получения средних значений. Фактически, среднее значение настолько часто приходится находить, что $\langle \psi | R | \psi \rangle$ часто сокращенно записывают как $\langle R \rangle$, так что для этого примера:

$$\langle R \rangle = 7$$

Рассмотрим линейные операторы

Оператор A называется линейным, если он удовлетворяет следующему условию:

$$A(c_1|\psi\rangle + c_2|\phi\rangle) = c_1A|\psi\rangle + c_2A|\phi\rangle$$

Что на самом деле означает это уравнение? Если оператор A действует на линейную комбинацию двух кетов (левая часть уравнения), то это эквивалентно линейной комбинации тех же кетов, на которые A действует по отдельности (правая часть уравнения). Другими словами, линейный оператор не делает чего-то странного, что сложным образом переплетает два кета. Он позволяет разделить две части и рассматривать их $|\phi\rangle\langle\chi|$ по отдельности или, наоборот, объединять их вместе.

Я предлагаю рассмотреть выражение $|\phi\rangle\langle\chi|$ как линейный оператор.

Чтобы доказать это, выполните следующие шаги, которые помогут лучше понять, что происходит при перемножении бра и кет:

- 1. Возьмите произведение бра $\langle\chi|$ и кет $c|\psi\rangle$, где c — комплексное число.**

Вы получите следующее уравнение:

$$\langle\chi|c|\psi\rangle = c\langle\chi|\psi\rangle$$

- 2. Возьмите произведение бра $\langle\chi|$ с суммой двух кет, $|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$.**

Вы получите следующее уравнение:

$$\langle\chi|(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \langle\chi|\psi_1\rangle + \langle\chi|\psi_2\rangle$$

- 3. Чтобы проверить, что $|\phi\rangle\langle\chi|$ является линейным оператором, примените его к линейной комбинации бра, где c_1 и c_2 — комплексные числа:**

$$|\phi\rangle\langle\chi|(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = |\phi\rangle\langle\chi|c_1|\psi_1\rangle + |\phi\rangle\langle\chi|c_2|\psi_2\rangle$$

4. Используя результат из шага 1, вы можете окончательно записать уравнение как

$$|\phi\rangle\langle\chi|(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1|\phi\rangle\langle\chi|\psi_1\rangle + c_2|\phi\rangle\langle\chi|\psi_2\rangle$$

Если вы посмотрите на условие, определяющее линейный оператор A в начале этого раздела, то можете не сразу заметить, что ваше конечное уравнение соответствует ему. Но если вы замените A в предыдущем уравнении на $|\phi\rangle\langle\chi|$, то действительно получите в точности это последнее уравнение!

Знакомство с эрмитовыми операторами и сопряжениями

Эрмитово сопряжение — также называемое сопряжением — оператора A обозначается как $A^\dagger$. Чтобы найти эрмитово сопряжение выражения $\langle\psi|A|\chi\rangle$, следуйте этим шагам:

1. **Замените комплексные константы их комплексно-сопряженными значениями.**

Эрмитово сопряжение комплексного числа является комплексно-сопряженным этого числа, которое обозначается как

$$a^\dagger = a^*$$

2. **Замените кет на соответствующие им бра, а бра на соответствующие им кет.**



ВНИМАНИЕ

При нахождении эрмитово сопряженного оператора необходимо поменять местами бра и кет. В отличие от нахождения эрмитово сопряженного комплексного числа, нахождение эрмитово сопряженного оператора — это не просто математическое нахождение комплексно-сопряженного значения.

3. **Замените операторы на их эрмитово сопряженные операторы.**

В квантовой механике операторы, равные своим эрмитово сопряженным, называются эрмитовыми операторами. Другими словами, оператор является эрмитовым, если

$$A^\dagger = A$$

Эрмитовы операторы встречаются на протяжении всей книги, и они обладают особыми свойствами. Например, матрица, представляющая их, может быть диагонализирована — то есть записана так, что ненулевые элементы появляются только по диагонали матрицы. Кроме

того, среднее значение эрмитова оператора гарантированно будет действительным числом, а не комплексным (см. предыдущий раздел «Я ожидал этого: Нахождение средних значений»).

4. Запишите окончательное уравнение.

$$(\langle \psi | A | \phi \rangle)^* = \langle \phi | A^\dagger | \psi \rangle$$



ЗАПОМНИ

Вот несколько полезных соотношений, касающихся эрмитово сопряженных операторов:

- » $(aA)^\dagger = a^* A^\dagger$
- » $(A^\dagger)^\dagger = A$
- » $(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$
- » $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$
- » $(AB|\psi\rangle)^\dagger = \langle \psi | B^\dagger A^\dagger$

Вперед и назад: Нахождение коммутаторов



ЗАПОМНИ

Мера того, насколько различаются результаты при последовательном применении операторов A и B в сравнении с B и A , называется *коммутатором* операторов. В квантовой механике коммутатор показывает, можно ли измерить два наблюдаемых свойства одновременно, или же эти свойства имеют некоторую зависимость друг от друга при измерении. Коммутатор операторов A и B определяется следующим образом:

$$[A, B] = AB - BA$$

Коммутирующие операторы

Два оператора коммутируют друг с другом, если их коммутатор равен нулю. И когда это так, два наблюдаемых свойства, представленные операторами, могут быть измерены одновременно. То есть операторы коммутируют, когда порядок их применения не имеет значения:

$$[A, B] = 0$$

Заметим, что любой оператор коммутирует сам с собой:

$$[A, A] = 0$$

И когда операторы коммутируют, легко показать, что коммутатор A, B является противоположным коммутатору B, A :

$$[A, B] = -[B, A]$$

Также верно, что коммутаторы линейны:

$$[A, B + C + D + \dots] = [A, B] + [A, C] + [A, D] + \dots$$

А эрмитово сопряжение коммутатора работает следующим образом:

$$[A, B]^\dagger = [B^\dagger, A^\dagger]$$

Можно также найти *антикоммутатор* — обозначаемый как $\{A, B\}$ — который является суммой, а не разностью применяемых операторов:

$$\{A, B\} = AB + BA$$

Нахождение антиэрмитовых операторов

Что можно сказать об эрмитово сопряженном коммутаторе двух эрмитовых операторов? Вот как это выяснить. Сначала запишем сопряженный оператор. Затем применим определение коммутаторов (см. предыдущий раздел). И поскольку вы обнаружили (в разделе «Эрмитовость эрмитовых операторов и сопряжений» ранее в этой главе), что $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ и $A = A^\dagger$ для эрмитовых операторов, вы можете проработать следующую последовательность:

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger$$

Но $BA - AB$ это просто $-[A, B]$, поэтому получаем уравнение:

$$[A, B]^\dagger = -[A, B]$$



ЗАПОМНИ

A и B здесь — эрмитовы операторы. Когда при взятии эрмитова сопряжения выражения вы получаете то же самое выражение с отрицательным знаком перед ним, такое выражение называется анти-эрмитовым. (Кстати, среднее значение анти-эрмитова оператора гарантированно будет чисто мнимым.)

Начиная с нуля и заканчивая Гейзенбергом

Если вы прочитали последние несколько разделов, теперь у вас есть все следующие новые инструменты: эрмитовы операторы и коммутаторы. Как можно применить эти знания? Вы можете вывести принцип неопределенности Гейзенберга, начиная практически с нуля.

(Я объясняю, почему этот принцип неопределенности важен, в разделе «Понимание некоторых соотношений с помощью кетов» ранее в этой главе.)

Вот расчет, который приведет вас от нескольких базовых определений к принципу неопределенности Гейзенберга. Такой расчет показывает, насколько проще использовать безбазисную бра-кет нотацию по сравнению с полной матричной версией векторов состояния. (Гейзенберг вывел свой принцип неопределенности в 1927 году, но нотация Дирака не была создана до 1939 года, поэтому принцип был изначально выведен с использованием гораздо более громоздкого матричного подхода, который Гейзенберг также изобрел.)

Вы можете знать, как вычислить неопределенность измерения из предыдущей работы со статистикой. Это делается путем вычитания квадрата среднего значения из среднего значения квадрата величины. Для эрмитовых операторов A и B это дает вам:

$$\Delta A = (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)^{1/2}$$

$$\Delta B = (\langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2)^{1/2}$$

Теперь рассмотрим операторы ΔA и ΔB (не неопределенности) и предположим, что применение этих операторов дает вам измеренные значения следующим образом:

$$\Delta A = A - \langle A \rangle$$

$$\Delta B = B - \langle B \rangle$$

Как любой оператор, они могут давать новые кеты:

$$\Delta A|\psi\rangle = |\chi\rangle$$

$$\Delta B|\psi\rangle = |\phi\rangle$$

Вот ключевой момент: неравенство Шварца (из предыдущего раздела «Понимание некоторых соотношений с помощью кетов») дает вам:

$$\langle \chi|\chi \rangle \langle \phi|\phi \rangle \geq |\langle \chi|\phi \rangle|^2$$



ПОДСКАЗКА

Как видите, знак неравенства $\geq$, который играет большую роль в принципе неопределенности Гейзенберга, уже появился в вычислениях.

Поскольку $\Delta A^\dagger = \Delta A$ (это определение эрмитова оператора), можно увидеть, что:

$$\langle \chi|\chi \rangle = \langle \psi|\Delta A^\dagger \Delta A|\psi \rangle = \langle \psi|\Delta A^2|\psi \rangle$$

То есть, $\langle \chi | \chi \rangle = \langle \Delta A^2 \rangle$. Аналогичным образом, $\langle \phi | \phi \rangle = \langle \Delta B^2 \rangle$. Таким образом, неравенство Шварца можно переписать в виде:

$$\langle \Delta A^2 \rangle \langle \Delta B^2 \rangle \geq |\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2$$

Применяя некоторые хитрые математические преобразования и используя известные свойства эрмитовых операторов, в итоге можно привести уравнение к следующей форме:

$$\langle \Delta A^2 \rangle \langle \Delta B^2 \rangle \geq 1/4 |\langle [A, B] \rangle|^2$$

Это комбинированное уравнение приводит нас к соотношению неопределенностей Гейзенберга (которое было представлено в главе 3), имеющему вид:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle \Delta A^2 \rangle = \Delta A^2$$

Теперь можно вернуться к ранее полученному комбинированному уравнению — тому, которое должно отражать соотношение неопределенностей Гейзенберга — и применить соотношение, рассчитанное с использованием среднего значения (к обоим A и B). Подставляя это и извлекая квадратный корень, получаем:

$$\langle \Delta A^2 \rangle \langle \Delta B^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$$

$$\Delta A^2 \Delta B^2 \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$$

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$$

Так-так-так. Значит, произведение двух неопределенностей больше или равно половине абсолютного значения коммутатора их соответствующих операторов? Впечатляет. Является ли это соотношением неопределенностей Гейзенберга? Давайте посмотрим. В квантовой механике оператор импульса (упомянутый ранее в разделе «Работа с операторами») выглядит так:

$$\mathbf{P} = -i\hbar \nabla$$

А оператор проекции импульса на ось x имеет вид:

$$P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Итак, каков коммутатор оператора X (который просто возвращает x-координату частицы) и P_x ? Известно, что $[X, P_x] = i\hbar$, поэтому из

$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$ получаем следующее уравнение (помните, это неопределенности в x и p_x , а не операторы):

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Отлично! Это и есть соотношение неопределенностей Гейзенберга. Я не накладывал фактических ограничений на физический мир с помощью чистой математики... но я показал, исходя из нескольких базовых предположений, что невозможно *измерить* физический мир с абсолютной точностью.

Собственные векторы и собственные значения: Что это такое

В предыдущем разделе вы узнали, что применение оператора к кет-вектору может привести к появлению нового кет-вектора. Например, когда вы применяете оператор A , вы можете получить следующий результат:

$$A|\psi\rangle = |\chi\rangle$$



ЗАПОМНИ

Чтобы упростить работу с векторами, можно использовать собственные векторы и собственные значения. Собственные векторы и собственные значения являются центральным понятием в линейной алгебре и позволяют применять операторы без изменения вектора состояния. Они также помогают находить решения дифференциальных уравнений. Вектор $|\psi\rangle$ является *собственным вектором* оператора A , если для некоторой комплексной константы a :

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$$

Обратите внимание, что здесь происходит: применение A к одному из его собственных векторов дает вам тот же самый вектор обратно, умноженный на число a . Это число называется *собственным значением* данного собственного вектора. Хотя a может быть комплексной константой, собственные значения эрмитовых операторов являются действительными числами, а их собственные векторы ортогональны (то есть $\langle \psi | \phi \rangle = 0$). Для получения дополнительной информации см. раздел «Понимание некоторых соотношений с помощью кет-векторов» ранее в этой главе.

Представление задачи в терминах собственных векторов и собственных значений может значительно упростить жизнь, поскольку применение оператора к его собственным векторам просто дает вам тот же собственный вектор обратно, умноженный на его собственное

значение — нет никакого неприятного изменения состояния, поэтому вам не нужно иметь дело с другим вектором состояния.

Рассмотрим эту идею на примере оператора R для броска костей, который в матричной форме выражается следующим образом (см. предыдущий раздел «Я ожидал этого: Нахождение ожидаемых значений» для более подробной информации об этой матрице):

$$R = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 11 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \end{bmatrix}$$

Оператор R работает в 11-мерном пространстве и является эрмитовым, поэтому у оператора будет 11 ортогональных собственных векторов и 11 соответствующих собственных значений.

Поскольку R является диагональной матрицей, найти собственные векторы легко. В качестве собственных векторов можно взять единичные векторы в 11 различных направлениях. Вот как выглядят некоторые из собственных векторов — первый (ξ_1), второй (ξ_2) и так далее до последнего, одиннадцатого собственного вектора (ξ_{11}):

$$\xi_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \xi_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \xi_{11} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Каждый собственный вектор имеет нулевые значения, кроме одной позиции. Это означает, что ни один из этих векторов нельзя записать как линейную комбинацию других векторов. Они линейно независимы друг от друга и в данном случае также ортогональны. Они определяют базис этого 11-мерного пространства костей.

А что насчет собственных значений? Это числа, которые вы получаете, когда действуете оператором R на собственный вектор. Поскольку собственные векторы — это просто единичные векторы во всех 11 измерениях, собственные значения — это числа на диагонали матрицы R : 2, 3, 4 и так далее до 12.

Понимание принципа работы



ЗАПОМНИ

Собственные векторы эрмитова оператора определяют полный набор ортонормированных векторов — то есть полный базис для пространства состояний. (Информацию об ортонормированных векторах см. в разделе «Понимание некоторых соотношений с помощью кет-векторов» ранее в этой главе.) При рассмотрении в этом «собственном базисе», построенном из собственных векторов, оператор в матричном представлении является диагональным, а элементы вдоль диагонали матрицы являются собственными значениями.

Изначально у вас может быть довольно беспорядочная матрица. Имейте в виду, что элементами оператора могут быть также функции, а не только числа. До сих пор в этой главе примеры были довольно простыми, поскольку содержали только числовые элементы в матрице, но даже с числами матрица может стать некрасивой... или, как любят говорить преподаватели математики, «неэлегантной».

Переходя от такой некрасивой матрицы к базису собственных векторов оператора, вы диагонализуете матрицу во что-то более похожее на то, что вы видели ранее, с чем гораздо проще работать. Если вы хотите глубже изучить математику вычисления собственных значений или собственных векторов, можете также обратиться к книге «Линейная алгебра для чайников».

Если два или более собственных значения одинаковы, такое собственное значение называется вырожденным. Так, например, если три собственных значения равны 6, то собственное значение 6 является трехкратно *вырожденным*.

Вот еще одна интересная вещь: если два эрмитовых оператора A и B коммутируют и если A не имеет вырожденных собственных значений, то каждый собственный вектор A также является собственным вектором B . (Подробнее о коммутации см. в предыдущем разделе «Вперед и назад: нахождение коммутатора».)

Нахождение собственных векторов и собственных значений

Итак, как найти собственные векторы и собственные значения оператора, заданного в матричной форме? Вот уравнение, которое нужно решить:

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$$

И это уравнение можно переписать в следующем виде:

$$(A - aI)|\psi\rangle = 0$$

где «I» представляет собой *единичную матрицу* с единицами по диагонали и нулями в остальных позициях:

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ & & & & & \vdots & & & & & \dots \end{bmatrix}$$



ЗАПОМНИ

Решение уравнения $(A - aI)|\psi\rangle = 0$ существует, только если *определитель* (скалярное значение, вычисляемое из элементов матрицы) матрицы $A - aI$ равен 0:

$$\det(A - aI) = 0$$

Нахождение собственных значений

Любые значения λ , удовлетворяющие уравнению $\det(A - aI) = 0$, являются собственными значениями исходного уравнения. Попробуем найти собственные значения и собственные векторы следующей матрицы:

$$A = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 2 & -4 \end{bmatrix}$$

Сначала преобразуем матрицу в форму $A - aI$, которая имеет только единицы на диагональных позициях и нули везде. Поскольку мы

вычитаем aI , мы будем вычитать a из диагональных элементов матрицы A :

$$A - aI = \begin{bmatrix} -1-a & -1 \\ 2 & -4-a \end{bmatrix}$$

Далее находим определитель:

$$\det(A - aI) = (-1 - a)(-4 - a) + 2 = a^2 + 5a + 6$$

И это уравнение можно разложить на множители:

$$\det(A - aI) = a^2 + 5a + 6 = (a + 2)(a + 3)$$

Поскольку $\det(A - aI) = 0$, собственными значениями A являются корни этого уравнения, а именно $a_1 = -2$ и $a_2 = -3$.

Нахождение собственных векторов

Как насчет нахождения собственных векторов? Чтобы найти собственный вектор, соответствующий a_1 , подставим a_1 (первое собственное значение, 2) в матрицу в форме $A - aI$:

$$A - aI = \begin{bmatrix} -1-a & -1 \\ 2 & -4-a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 2 & -2 \end{bmatrix}$$

Таким образом, вы получаете:

$$(A - aI)|\psi\rangle = 0 \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 2 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Поскольку каждая строка этого матричного уравнения должна быть верной, вы знаете, что $\psi_1 = \psi_2$. Оба элемента собственного вектора будут одинаковыми. Проще всего использовать значение 1 для каждого элемента (позже при использовании в качестве базиса его всегда можно умножить на какое-то число), что дает вам следующий собственный вектор для первого собственного значения:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

А как насчет собственного вектора, соответствующего a_2 ? Подставляя $a_2 = -3$, в матрицу в форме $A - aI$, получаем:

$$A - aI = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 2 & -1 \end{bmatrix}$$

$$(A - aI)|\psi\rangle = 0 \Rightarrow \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Это дает уравнения:

$$\begin{aligned} 2\psi_1 - \psi_2 &= 0 \\ \psi_1 &= \psi_2 \div 2 \end{aligned}$$

Решая их, можно показать, что второй элемент всегда будет вдвое больше первого, что означает, что собственный вектор, соответствующий a_2 , равен:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Подготовка к обращению: упрощение с унитарными операторами

Применение *обратного* оператора отменяет действие исходного оператора (поэтому он и называется обратным), так что когда обратный оператор действует на себя, он становится тождественным оператором, то есть единичной матрицей:

$$A^{-1}A = AA^{-1} = I$$

Иногда полезно найти обратный оператор, например, когда вы хотите решить уравнения вида $Ax = y$. Решить относительно x легко, если вы можете найти обратный оператор A : $x = A^{-1}y$.

Однако найти обратную матрицу для большой матрицы часто нелегко, поэтому в квантовой физике вычисления иногда ограничиваются работой с унитарными операторами U , где обратный оператор равен его эрмитово сопряженному: $U^{-1} = U^\dagger$. (Чтобы найти эрмитово сопряженный оператор A , нужно найти транспонированную матрицу, поменяв местами строки и столбцы, A^T . Затем возьмите комплексно-сопряженное значение, $A^{T*} = A^\dagger$.) Это дает следующее выражение:

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I$$

Произведение двух унитарных операторов U и V также является унитарным, поскольку

$$(UV)(UV)^\dagger = (UV)(V^\dagger U^\dagger) = U(VV^\dagger)U^\dagger = UU^\dagger = I$$

При использовании унитарных операторов кеты и бра преобразуются следующим образом:

$$\left| \begin{array}{l} \gg |\psi'\rangle = U|\psi\rangle \\ \gg \langle\psi'| = \langle\psi|U^\dagger \end{array} \right.$$

А другие операторы можно преобразовывать с помощью унитарных операторов так:

$$A' = UAU^\dagger$$

Предыдущие уравнения также означают следующее:

- » $|\psi\rangle = U^\dagger|\psi'\rangle$
- » $\langle\psi| = \langle\psi'|U$
- » $A = U^\dagger A' U$



ЗАПОМНИ

Вот некоторые свойства унитарных преобразований:

- » Если оператор является эрмитовым, то его унитарно преобразованная версия $A' = UAU^\dagger$ также является эрмитовой.
- » Собственные значения оператора A и его унитарно преобразованной версии $A' = UAU^\dagger$ одинаковы.
- » Коммутаторы, равные комплексным числам, не изменяются при унитарных преобразованиях: $[A', B'] \rightarrow [A, B]$.

Сравнение матричного и непрерывного подходов

Вернер Гейзенберг разработал матричный подход к квантовой физике, который вы использовали до сих пор в этой главе. Его иногда называют матричной механикой. Матричное представление хорошо подходит для многих задач, но иногда его оказывается недостаточно, как вы узнаете в этом разделе.



ЗАПОМНИ

Матричный метод Гейзенберга лучше всего использовать для физических систем с четко определенными энергетическими состояниями, таких как гармонические осцилляторы. Подход Шрёдингера, волновая механика, использует волновые функции, в основном в координатном представлении, сводя задачи квантовой физики к дифференциальным уравнениям.

Одна из главных целей решения задач квантовой механики — вычисление энергетических уровней системы. Оператор энергии называется гамильтонианом¹, H , и нахождение энергетических уровней системы сводится к поиску соответствующих собственных значений:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

¹ На самом деле оператор энергии в общем случае отличается от гамильтониана: последний соответствует функции Гамильтона, не всегда совпадающей с энергией системы. Во всех случаях, рассматриваемых в данном учебнике, они совпадают, поэтому различий между ними автор не делает.

Здесь E — собственное значение оператора H . То же самое уравнение можно записать в матричной форме:

$$\begin{bmatrix} H_{11} - E & H_{12} & H_{13} & H_{14} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} - E & H_{23} & H_{24} & \cdots \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} - E & H_{34} & \cdots \\ H_{41} & H_{42} & H_{43} & H_{44} - E & \cdots \\ \vdots & & & & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ \vdots \end{bmatrix} = 0$$

Допустимые энергетические уровни физической системы — это собственные значения E , удовлетворяющие этому уравнению. Если у вас есть дискретный базис собственных векторов — то есть число энергетических состояний конечно, — тогда вы можете приравнять определитель к нулю, чтобы найти эти собственные значения.

Но что, если число энергетических состояний бесконечно? В этом случае вы больше не можете использовать дискретный базис для ваших операторов, бра и кет — вы должны использовать непрерывный базис.

Переход к непрерывному случаю с помощью интегрального исчисления

Представление квантовой механики в непрерывном базисе — изобретение физика Эрвина Шрёдингера. В непрерывном базисе суммы становятся интегралами. Например, возьмем следующее соотношение, где I — единичная матрица:

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = I$$

Оно превращается в следующий интеграл:

$$\int d\phi |\phi\rangle \langle \phi| = I$$

Подобно тому, как каждый кет $|\psi\rangle$ может быть разложен по дискретному базису других кетов $|\phi_n\rangle$, в случае непрерывного базиса он может быть разложен по нему следующим образом:

$$|\psi\rangle = \int d\phi |\phi\rangle \langle \phi|\psi\rangle$$

Делая волну

Рассмотрим оператор положения R в непрерывном базисе. Применение этого оператора дает вам $\mathbf{r}$, радиус-вектор:

$$\mathbf{R}|\psi\rangle = \mathbf{r}|\psi\rangle$$

В этом уравнении применение оператора положения к вектору состояния возвращает радиус-векторы $\mathbf{r}$ с координатами, в которых может быть обнаружена частица. Любой кет можно разложить в базисе координат следующим образом:

$$|\psi\rangle = \int d^3r |r\rangle \langle r|\psi\rangle$$

И это становится:

$$|\psi\rangle = \int d^3r \psi(r) |r\rangle$$



ЗАПОМНИ

Вот что очень важно понять: $\psi(r) = \langle r|\psi\rangle$ — это волновая функция для вектора состояния $|\psi\rangle$ — это представление кета в координатном базисе. Или, говоря простым языком, это просто функция, где величина $|\psi(r)|^2 d^3r$ представляет вероятность того, что частица будет обнаружена в элементе объема d^3r в точке r .

Волновая функция является основой так называемой волновой механики, в отличие от матричной механики. Важно понимать, что когда вы говорите о представлении физических систем в волновой механике, вы не используете безбазисные бра и кеты матричной механики; вместо этого вы обычно используете волновую функцию — то есть бра и кеты в координатном базисе.

Таким образом, вы переходите от $|\psi\rangle$ к $\langle r|\psi\rangle$, что равно $\psi(r)$. Эта волновая функция является центральным математическим объектом в квантовой физике, и это просто кет в координатном базисе. Поэтому в волновой механике $\mathbf{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ становится следующим:

$$\langle r|\mathbf{H}|\psi\rangle = E\langle r|\psi\rangle$$

Это можно записать как:

$$\langle r|\mathbf{H}|\psi\rangle = E\langle r|\psi\rangle$$

Но что такое $\langle r|\mathbf{H}|\psi\rangle$? Это равно $\mathbf{H}\psi(r)$. Оператор Гамильтона $\mathbf{H}$ представляет полную энергию системы, кинетическую ($p^2/2m$) плюс потенциальную ($V(r)$), поэтому вы получаете следующее уравнение:

$$\mathbf{H} = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

Но оператор импульса есть:

$$\mathbf{P}|\psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}|\psi\rangle \mathbf{i} - i\hbar \frac{\partial}{\partial y}|\psi\rangle \mathbf{j} - i\hbar \frac{\partial}{\partial z}|\psi\rangle \mathbf{k}$$

Следовательно, подставляя оператор импульса вместо p , получаем:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(r)$$

Используя оператор Лапласа, вы получаете это уравнение:

$$\nabla^2 |\psi\rangle = \frac{\partial^2}{\partial x^2} |\psi\rangle + \frac{\partial^2}{\partial y^2} |\psi\rangle + \frac{\partial^2}{\partial z^2} |\psi\rangle$$

Это уравнение можно переписать следующим образом (оно называется *стационарным уравнением Шрёдингера*):

$$H\psi(r) = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

Таким образом, в волномеханическом представлении квантовой физики вы теперь работаете с дифференциальным уравнением вместо множества матричных элементов. Все это возникло из-за работы в координатном представлении, $\psi(r) = \langle r|\psi\rangle$, вместо просто $|\psi\rangle$.

Квантовая физика в оставшейся части книги в основном посвящена решению этого дифференциального уравнения для различных потенциалов $V(r)$. То есть основное внимание уделяется поиску волновой функции, удовлетворяющей уравнению Шрёдингера для различных физических систем. Когда вы решаете уравнение Шрёдингера для $\psi(r)$, вы можете найти разрешенные энергетические состояния физической системы, а также вероятность того, что система будет находиться в определенном положении.

Заметим, что помимо волновых функций в координатном представлении можно также записать волновую функцию в импульсном представлении $\psi(p)$ или в любом другом базисе.

- » Определение прямоугольных ям
- » Понимание потенциальных ям
- » Работа с бесконечными прямоугольными ямами
- » Определение уровней энергии
- » Ловля частиц с помощью потенциальных барьеров
- » Работа со свободными частицами

Глава 8

Застрелая в энергетических ямах

В классическом телесериале собака по кличке Лесси всегда приходила на помощь. Обычно происходил диалог, где собака лаяла, а люди пытались интерпретировать ее лай: «Что случилось, Лесси? Тимми застрел в яме?»

К счастью, сегодня Тимми не застрел в яме, но вместо этого вы обнаружите электроны, застрявшие в ямах. В *потенциальных ямах*, если быть точным. И, к несчастью для электронов (но, полагаю, к счастью для Тимми), эти ямы связывают электроны таким образом, что они не могут выбраться, просто ухватившись за спущенную вниз веревку.

В этой главе вы увидите квантовую физику в действии при решении задач с энергетическими ямами в одном измерении. В квантовой физике, поскольку энергия квантуется, допустимы только определенные энергетические состояния. Вы проанализируете частицы, захваченные в потенциальных ямах, и найдете разрешенные энергетические состояния, используя квантовую физику. В классической физике захваченные частицы не ограничены каким-либо конкретным энергетическим спектром, но когда мир становится микроскопическим, вступает в силу квантовая физика.

Если вы не читали предыдущую главу, то вы не видели моего объяснения того, как вывести уравнение Шрёдингера для волновой

функции — ключевое уравнение, которое я использую в этой главе. Поэтому я советую вам найти этот материал в Главе 7. Используя уравнение Шрёдингера, вы можете решить задачу для волновой функции $\psi(x)$ и уровней полной энергии E для частиц в потенциальных ямах:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r)$$

Примечание: Помимо уравнения Шрёдингера (представленного в главе 7), в этой главе используются базовые тригонометрические функции (такие как синус и косинус), дифференциальные уравнения второго порядка и интегралы из математического анализа. Знакомство с этими математическими функциями и связанными с ними вычислениями дает хорошую основу для вывода уравнений в этой главе. Я не вдаюсь в подробности, например, о том, как находить решения дифференциальных уравнений второго порядка. Это выходит за рамки этой книги. (Хотя для интересующихся существует книга «Дифференциальные уравнения для чайников».)

Глядя в прямоугольную яму

Так что же такое потенциальная яма? Представьте ее с точки зрения гравитации. Допустим, у вас есть виноградина, которую вы бросаете в большую миску, например, в миску для смешивания с крутыми стенками. Виноградина естественным образом окажется на дне миски. Она может немного перемещаться внутри миски (пока вы ходите, неся миску), но не выпрыгнет из нее. Даже если вы встряхнете миску так, что виноградина начнет катиться, она вряд ли выкатится наружу. Чтобы выкатиться из миски, виноградине нужно преодолеть потенциальную энергию гравитации, которую создают стенки миски. Для этого виноградина должна каким-то образом получить много энергии.

Аналогично, когда мы рассматриваем потенциальные ямы в этой главе, мы имеем дело с частицами, которые заперты между крутыми «стенками» потенциальной энергии. Частица должна двигаться внутри ямы и не может выбраться — по крайней мере, в случаях, рассматриваемых в этой главе.

Для упрощения примера я рассматриваю частицу в одном измерении (в отличие от трехмерного примера с виноградиной в чаше), так что частица может двигаться только линейно влево или вправо. И я немного схитрю, сначала сосредоточившись на удобном типе потенциальной ямы. *Прямоугольная яма* — это потенциал (то есть потенциальная энергетическая яма), который имеет прямоугольную форму, как показано на рисунке 8-1.

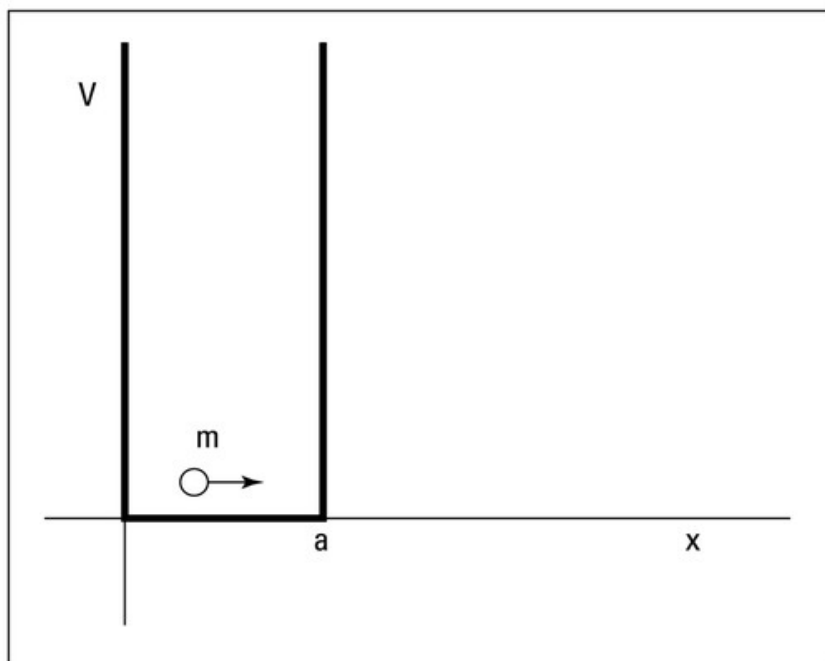


РИСУНОК 8-1.

Прямоугольная потенциальная яма.

Еще одно упрощение примера заключается в том, что я предполагаю, что потенциальную энергию невозможно преодолеть. Бесконечная энергия может пока не существовать в реальности, но для наших целей это полезное приближение для моделирования действительно большой энергии по сравнению с энергией захваченной частицы. Потенциальная яма имеет некоторую горизонтальную протяженность, которую я просто называю a . Одна из замечательных особенностей физики заключается в том, что обычно можно выбрать координаты эксперимента так, чтобы сделать математические расчеты наиболее удобными, поэтому я предполагаю, что крайняя левая стенка потенциальной ямы находится при $x = 0$.

Для прямоугольной потенциальной ямы — которая будет называться уже *потенциальным ящиком* — любого размера a потенциал, или $V(x)$, стремится к бесконечности при $x = 0$ и $x > a$ (где x — это расстояние), вот так:

- » $V(x) = \infty$, где $x < 0$ или $x > a$
- » $V(x) = 0$, где $0 \leq x \leq a$

Катается ли частица просто туда-сюда по дну прямоугольной ямы в области от 0 до a , где $V(x) = 0$? Не совсем. Помните, что в квантовой физике энергия принимает дискретные квантованные значения. Частица находится в связанном состоянии, и ее волновая функция зависит от ее энергии. Обсуждение дискретных квантованных значений и волновых функций вы можете найти в главе 4.

Позже в этой главе (в разделе «Захват частиц в бесконечных прямоугольных потенциальных ямах») вы узнаете, как вывести волновую функцию и энергетические состояния частиц в прямоугольной яме. Пока же полезно просто понять концепцию того, что происходит в потенциальных ямах.

Ловим частицы в потенциальной яме

Когда речь идет о захвате частицы в потенциальных ямах, ключевой особенностью является то, сколько энергии имеет частица. Поскольку рассматриваемая частица не имеет возможности получить дополнительную энергию извне, полная энергия частицы E равна сумме ее кинетической энергии и потенциальной энергии (V), как показано в этом уравнении:

$$\frac{p^2}{2m} + V = E$$

Взгляните на потенциальную яму на рисунке 8-2. Обратите внимание на впадину, или *яму*, в потенциальном пути (изображенную жирной черной линией), которая означает, что частицы могут быть захвачены во впадине, если у них недостаточно энергии для побега. Этот рисунок гораздо больше похож на пример с виноградиной в чаше (из предыдущего раздела), чем на бесконечно крутые стенки прямоугольной ямы (см. Рисунок 8-1).

В этом разделе рассматриваются различные возможные состояния частицы с энергией E в потенциальной яме, изображенной на рисунке 8-2. С точки зрения квантовой механики эти состояния бывают двух типов: связанные и несвязанные. В этом разделе дается обзор этих состояний.

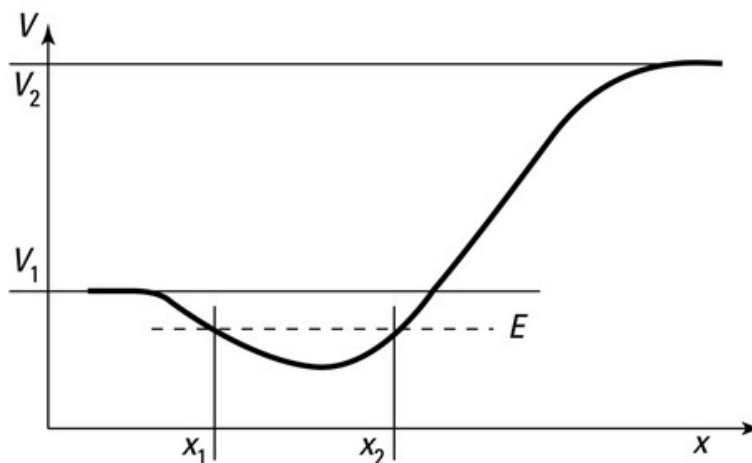


РИСУНОК 8-2.
Потенциальная яма.

Связывание частиц в потенциальных ямах

Связанные состояния возникают, когда частица не может свободно уходить на бесконечность. Другими словами, частица заключена в потенциальной яме. Частица, движущаяся в потенциальной яме, показанной на рисунке 8-2, находится в связанном состоянии, если ее энергия E меньше V_1 (что также делает ее меньше V_2). В этом случае частица движется между точками x_1 и x_2 . Частица, захваченная в такой яме, описывается волновой функцией, и можно решить уравнение Шрёдингера для допустимых волновых функций и разрешенных энергетических состояний. Уравнение Шрёдингера является *дифференциальным уравнением второго порядка*, что означает необходимость двух граничных условий для полного решения задачи.



ЗАПОМНИ

Связанные состояния являются дискретными — то есть они образуют серию дискретных энергетических уровней, а не непрерывный спектр энергий. Уравнение Шрёдингера дает вам эти состояния. Кроме того, в одномерных задачах никакие два энергетических уровня не совпадают. Или, используя технический термин, энергетические уровни связанного состояния не являются *вырожденными*.

Выход из потенциальных ям

Если энергия частицы E больше потенциала V_1 (см. рисунок 8-2), частица может выйти из потенциальной ямы. Возможны два случая: $V_1 < E < V_2$ и $E > V_2$. Рассмотрим их по отдельности.

Случай 1: Энергия между двумя потенциалами ($V_1 < E < V_2$)

Если $V_1 < E < V_2$, частица в потенциальной яме имеет достаточно энергии, чтобы преодолеть барьер слева, но не справа. Частица может свободно двигаться в отрицательную бесконечность, поэтому ее допустимая область x находится между $-\infty$ и x_1 .

В этом случае допустимые значения энергии являются непрерывными, а не дискретными, поскольку частица не полностью связана. Собственные значения энергии не вырождены — то есть никакие два энергетических решения не совпадают (подробнее о собственных значениях см. в главе 7).

Уравнение Шрёдингера представляет собой дифференциальное уравнение второго порядка, поэтому оно имеет два линейно независимых решения. Однако в данном случае только одно из этих решений не

расходится (не стремится к бесконечности). Если решение уходит в бесконечность, оно не может представлять реальное физическое решение задачи, поскольку бесконечности не существуют в реальной физической действительности. Часть работы в квантовой физике заключается в применении граничных условий, которые помогают ограничить уравнение так, чтобы оно было конечным.

Волновая функция в этом случае осциллирует при $x < x_2$ и быстро затухает при $x > x_2$.

Случай 2: Энергия больше высшего потенциала ($E > V_2$)

Если $E > V_2$, частица вообще не связана и может свободно перемещаться от минус бесконечности до плюс бесконечности.

Энергетический спектр непрерывен, а волновая функция оказывается суммой одной функции, описывающей движение частицы вправо, и другой, описывающей движение частицы влево. Таким образом, энергетические уровни разрешенного спектра являются *двукратно вырожденными* (частица уходит к бесконечности в обоих направлениях).

Это весь необходимый обзор — пора начать решать уравнение Шрёдингера для различных потенциалов, начиная с самого простого: бесконечно глубоких потенциальных ям.

Ловим частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме

Бесконечно глубокие потенциальные ямы, в которых стенки уходят в бесконечность, являются излюбленным объектом в задачах квантовой физики, поскольку их относительно легко решать. (Акцент делается на слове «относительно».) И во многих случаях использование бесконечного потенциала достаточно для получения хорошего первого приближения решения. В этом разделе вы можете изучить квантово-физический подход к этим задачам.

Нахождение выражения для волновой функции

Большинство вычислений в квантовой физике сводится к умению записать и интерпретировать правильную версию квантовой волновой функции. В этом разделе я проведу вас через этапы определения

волновой функции для данной ситуации (частицы в бесконечно глубоких потенциальных ямах). Ближе к концу этих этапов вы также узнаете о допустимых энергетических уровнях, которые определяет полученное уравнение для этой ситуации.

1. Определите координаты для записи уравнения Шрёдингера.

Рассмотрим бесконечно глубокую потенциальную яму, показанную на рисунке 8-1. Напомним, что потенциал ямы $V(x)$ определяется следующими соотношениями в зависимости от координаты x :

- $V(x) = \infty$ при $x < 0$ или $x > a$
- $V(x) = 0$ при $0 \leq x \leq a$

Чтобы начать анализ этой ситуации, нужно немного преобразовать уравнение Шрёдингера. Начнем с трехмерного уравнения, но в данном случае нас интересует только одно измерение, поэтому вместо радиус-вектора r будем использовать координату x . Оператор Лапласа ∇^2 (см. главу 7) в этом случае сводится к производной второго порядка по x , что приводит к следующему преобразованию:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

Если вам нужны более подробные сведения о различных системах координат, я подробно рассматриваю прямоугольные координаты в главе 12 и сферические координаты в главе 13.



ЗАПОМНИ

Обратите внимание на энергию E в уравнении Шрёдингера. Поскольку мы имеем дело с квантовой системой, энергия может принимать только дискретные значения. Разрешенными энергетическими состояниями будут все решения для E , удовлетворяющие этому уравнению. В конце этого процесса, когда у вас будет достаточно информации о волновой функции, вы сможете вычислить эти разрешенные уровни энергии.

2. Применяем конкретные ограничения и упрощаем, где возможно.

Теперь у вас есть уравнение Шрёдингера с нужными переменными (даже если вы пока не знаете, почему они вам нужны именно в таком виде). Начните с самых простых частей.

Для частицы в потенциальной яме $V(x) = 0$ внутри ямы, и весь средний член становится равным 0 (поскольку вы умножаете на ноль). Уравнение значительно упрощается:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x)$$

3. Преобразуем уравнение Шрёдингера в решаемую форму.

Поскольку в уравнении по-прежнему много постоянных членов, физики часто стараются сгруппировать их вместе, когда это возможно, чтобы привести все в порядок.



ПОДСКАЗКА

В общем случае нужно привести уравнение к выражению, равному нулю. Затем нужно посмотреть, есть ли в этом новом уравнении группы констант, которые можно объединить в одну константу. Здесь полезно знание дифференциальных уравнений, так как оно подсказывает, для каких форм уравнений можно найти решения.

Эта часть вычислений – просто базовая алгебра (хотя в середине уравнения встречаются производные), поэтому вы просто последовательно вносите изменения, чтобы уравнение приняло немного другой вид:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\left(\frac{2m}{-\hbar^2} \right) \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \left(\frac{2m}{-\hbar^2} \right) E \psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{2mE}{-\hbar^2} \psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k^2 \psi(x) = 0$$

где $k^2 = 2mE/\hbar^2$.

Эта новая переменная k называется *Волновым числом*. И k связано с нахождением E , поэтому когда вы найдете решение, включающее k , вы сможете использовать его для определения E .

4. Решаем дифференциальное уравнение для ψ .

Итак, теперь у вас есть дифференциальное уравнение второго порядка для волновой функции частицы, захваченной в бесконечно глубокой потенциальной яме:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k^2 \psi(x) = 0$$

Решение этого дифференциального уравнения довольно простое. Вы получаете два независимых решения:

$$\psi_1(x) = A \sin(kx)$$

$$\psi_2(x) = B \cos(kx)$$

где A и B – константы, которые еще предстоит определить.



ЗАПОМНИ

Общее решение уравнения $\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + k^2\psi(x) = 0$ представляет собой сумму двух независимых решений $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

5. Используем граничные условия и нормировку для нахождения констант.

Каковы граничные условия? На границах бесконечно глубокой потенциальной ямы потенциальная энергия бесконечна, что означает отсутствие вероятности нахождения частицы на самой границе. Именно так вы определили бесконечно глубокую потенциальную яму. А поскольку волновая функция представляет вероятность нахождения частицы в данной точке, то вероятность равна нулю на границах ($x = 0$ и $x = a$), тогда:

$$\psi(0) = 0$$

$$\psi(a) = 0$$

Используя простые тригонометрические соотношения и уравнения из шага 4 для граничных значений, найдите B . Затем используйте это решение для упрощения второго уравнения.

$$\psi(0) = A \sin(k0) + B \cos(k0) = 0 \Rightarrow B \cos(0) = 0 \Rightarrow B = 0$$

$$\psi(a) = A \sin(ka) + B \cos(ka) = 0 \Rightarrow A \sin(ka) = 0$$

Одно простое решение – рассмотреть случай, когда $A = 0$. Но если A и B равны 0, то вся волновая функция равна нулю, и частица не существует нигде. Поскольку $A \neq 0$, рассмотрим, какие другие решения дадут результат 0. Я покажу вам, как найти A , в следующем разделе «Нормировка волновой функции».

Однако прежде чем перейти к этому, необходимо определить значение k (см. следующий раздел), вычислив энергетические уровни для частицы, захваченной в потенциальной яме.

Определение энергетических уровней

Окончательная форма второго уравнения (из Шага 5 предыдущего раздела) дает некоторую информацию о значении k . Из базовой тригонометрии известно, что синус равен нулю, когда его аргумент кратен π . Другими словами, $\sin(ka) = 0$ всякий раз, когда:

$$ka = n\pi, \text{ где } n = 1, 2, 3 \dots$$



ПОДСКАЗКА

Заметим, что хотя $n = 0$ технически является решением, мы уже определили $\psi(0) = 0$ как часть граничных условий. Этот случай не является физическим решением. Физические решения начинаются с $n = 1$.

Итак, вы нашли выражение, представляющее все значения k , которые соответствуют описанной квантовой ситуации. Это уравнение можно немного переписать, чтобы выразить k :

$$k = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

А поскольку $k^2 = 2mE/\hbar^2$, вы получаете следующее уравнение для разрешенных энергетических состояний, где $n = 1, 2, 3 \dots$:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2} \Rightarrow E = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

Поздравляем! Вы только что нашли формулу для допустимых энергетических состояний частицы, находящейся в прямоугольной потенциальной яме. Это уравнение можно применить к любой конкретной частице массой m , заключенной в прямоугольную потенциальную яму размером a .

Обратите внимание, что первое физическое состояние соответствует $n = 1$, что дает следующее выражение — это низшее физическое состояние, которое могут занимать частицы в бесконечно глубокой прямоугольной яме:

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

Вычисление E для более высоких значений n будет соответствовать состояниям с более высокой энергией.

Давайте для интереса подставим некоторые числа в это уравнение энергии, предположив, что у нас есть электрон массой $9,11 \times 10^{-31}$ килограмм, заключенный в бесконечно глубокую прямоугольную яму шириной порядка *радиуса Бора* (средний радиус орбиты электрона в атоме водорода); скажем, $a = 3,00 \times 10^{-10}$ метров. Предыдущее уравнение дает нам следующую энергию для основного состояния:

$$\frac{(1.0 \times 10^{-34})^2}{2(9.11 \times 10^{-31})} \frac{(3.14)^2}{(3.00 \times 10^{-10})^2} = 6.69 \times 10^{-18} \text{ Джоулей}$$

Это очень малое количество энергии, около 4,2 *электрон-вольт* (эВ — количество энергии, которое приобретает один электрон при прохождении разности потенциалов в 1 вольт). Тем не менее это уже сравнимо с энергией электрона в основном состоянии атома водорода (13,6 эВ), так что можно сказать, что мы определенно находимся в правильном диапазоне квантовой физики.

Нормировка волновой функции

После расчета энергетических уровней для частицы, захваченной в прямоугольной яме, можно более детально рассмотреть волновую функцию, описывающую эту ситуацию. Необходимо выполнить нормировку волновой функции, то есть убедиться, что вероятность, представленная волновой функцией, соответствует физической реальности. Используя знание о бесконечных граничных условиях, вы можете найти волновую функцию (см. предыдущий раздел). Вы можете взять уравнение волновой функции и подставить в него значение k (также из предыдущего раздела) для физически допустимых состояний.

$$\psi(a) = A \sin(ka) \Rightarrow \psi(a) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

Волновая функция представляет собой синусоидальную волну, обращающуюся в ноль при $x = 0$ и $x = a$. На рисунке 8-3 показаны графики первых двух волновых функций.

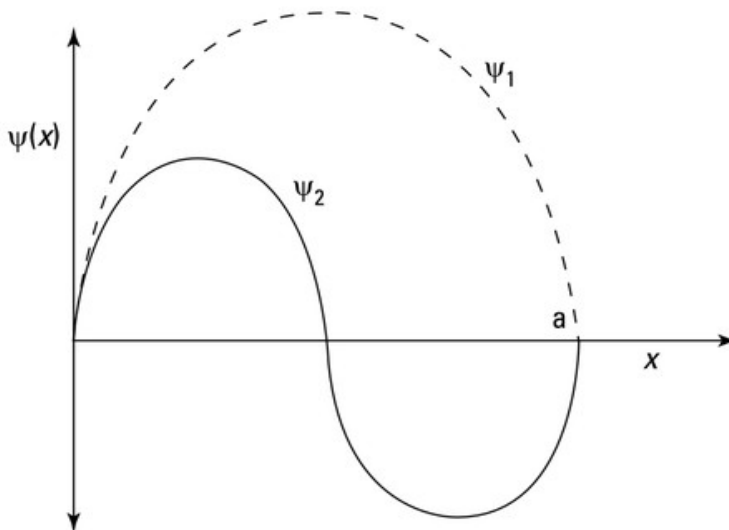


РИСУНОК 8-3.
Волновые функции в прямоугольной потенциальной яме.

Однако вы все еще не знаете значение A , и следующий шаг — найти его. В данной ситуации предположим, что частица находится где-то внутри ямы. Так и должно быть — вы поместили ее туда, и у нее нет способа выбраться! (Если вы собираетесь спросить о том, как частицы могут убежать, подождите! Я объясню квантовое туннелирование позже в этой главе. Пока просто предположим, что частица находится где-то в этой яме.) Когда частица находится где-то в яме, а волновая функция представляет вероятность ее нахождения в любой точке, сумма этих вероятностей по всей яме должна равняться 1 (см. главы 2, 3 и 7 для получения дополнительной информации о вероятностях).

Этот процесс называется *нормировкой волновой функции*. В нормированной функции вероятность обнаружения частицы между x и dx , $|\psi(x)|^2 dx$, при интегрировании по всей прямоугольной яме от $x = 0$ до $x = a$ должна давать 1:

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

Подставляя решение для $\psi(x)$, получаем следующее выражение, которое можно проинтегрировать, решить относительно A , а затем подставить полученное значение A обратно в уравнение волновой функции.

$$\begin{aligned} 1 &= |A|^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \\ 1 &= |A|^2 \left(\frac{a}{2}\right) \\ A &= \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \\ \psi(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \end{aligned}$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$

И вуаля... это нормированная волновая функция для частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме!

Добавление временной зависимости в волновые функции

До сих пор вычисления в этой главе игнорировали фактор времени, и это нормально, но существует нестационарное уравнение Шрёдингера, которое стоит рассмотреть, поскольку в реальной Вселенной (иногда) вещи меняются со временем. Главное математическое изменение заключается в том, что волновая функция теперь зависит не только от положения r (или x в одномерных случаях, рассматриваемых в этой книге), но также и от времени t . Зависящее от времени уравнение выглядит так:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = H\psi(r, t)$$

Здесь H — это эрмитов оператор Гамильтона, который вы можете найти в главе 7. Применяя его и фокусируясь только на одном изме-

рении, получаем другую форму зависящего от времени уравнения Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x, t) \psi(x, t)$$

Однако это уравнение проще, чем кажется, поскольку потенциальная энергия не меняется со временем. Фактически, поскольку E постоянна, а эрмитов оператор Гамильтона просто возвращает постоянную энергию, исходное зависящее от времени уравнение Шрёдингера принимает вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = E \psi(x, t)$$

Полученное уравнение значительно упрощает жизнь — решить зависящее от времени уравнение Шрёдингера легко, если иметь дело с постоянной потенциальной энергией. Просто добавьте немного магии дифференциальных уравнений (и, возможно, поищите решение в справочнике по дифференциальным уравнениям). В данном случае решение имеет вид:

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$



ЗАПОМНИ

Изящно. Когда потенциал не меняется со временем, решение зависящего от времени уравнения Шрёдингера просто становится произведением $\psi(x)$ — пространственной части (зависящей только от x , но не от t), и $e^{-iEt/\hbar}$ — зависящей от времени части (зависящей только от t , но не от x).

Итак, когда вы добавляете зависящую от времени часть к независящей от времени волновой функции (см. раздел «Нормировка волновой функции» ранее в этой главе), вы получаете зависящую от времени волновую функцию, которая выглядит так:

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-iEt/\hbar} \quad n = 1, 2, 3$$

Энергия n -го квантового состояния (определенная в разделе «Определение энергетических уровней» ранее в этой главе) равна:

$$E = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, 3$$

Следовательно, результирующая зависящая от времени волновая функция имеет вид:

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \exp\left(-\frac{in^2 \hbar \pi^2 t}{2ma^2}\right) \quad n = 1, 2, 3$$



ПОДСКАЗКА

Термин $\exp$ в предыдущем уравнении представляет собой натуральную экспоненциальную функцию e , но записан таким образом, чтобы было легче читать все выражение в квадратных скобках, что было бы затруднительно, если бы они находились в показателе степени.

Переход к симметричным прямоугольным потенциальным ямам

Стандартная бесконечно глубокая потенциальная яма простирается от $x = 0$ до $x = a$. Но что, если мы хотим сдвинуть координаты так, чтобы потенциальная яма была симметрична относительно начала координат? В этом случае новая бесконечно глубокая потенциальная яма выглядит следующим образом:

$$\left| \begin{array}{l} \gg V(x) = \infty, \text{ при } x < -\frac{a}{2} \text{ или } x > \frac{a}{2} \\ \gg V(x) = 0, \text{ при } -\frac{a}{2} \geq x \geq \frac{a}{2} \end{array} \right.$$

Можно перейти от этой новой потенциальной ямы к старой, добавив $a/2$ к x , что означает, что волновую функцию для новой потенциальной ямы можно записать следующим образом:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}\left(x + \frac{a}{2}\right)\right) \quad n = 1, 2, 3$$

Используя тригонометрические преобразования, получаем следующие уравнения:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} \quad n = 1, 3, 5 \dots \\ \psi(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad n = 2, 4, 6 \dots \end{aligned}$$

Результатом является смесь синусов и косинусов. Предоставляю вам самим разобраться со связанными состояниями и определить, существуют ли в них какие-либо закономерности. (**совет:** Сравните симметрию состояний косинуса и синуса.)

Ограниченный потенциал: взглянем на частицы и потенциальные ступеньки

По-настоящему бесконечные потенциалы встречаются редко. Расчеты из предыдущих разделов являются простейшими отправными точками и часто дают хорошие приближения для реальных ситуаций.

В этом разделе мы рассмотрим некоторые примеры из реального мира, где потенциал имеет некоторое конечное значение V_0 , а не бесконечность. Например, на рисунке 8-4 частица движется к точке, где происходит внезапное увеличение потенциальной энергии, называемое *потенциальной ступенькой*. В настоящий момент частица находится в области, где $V = 0$, но вскоре она окажется в области, где $V = V_0$.

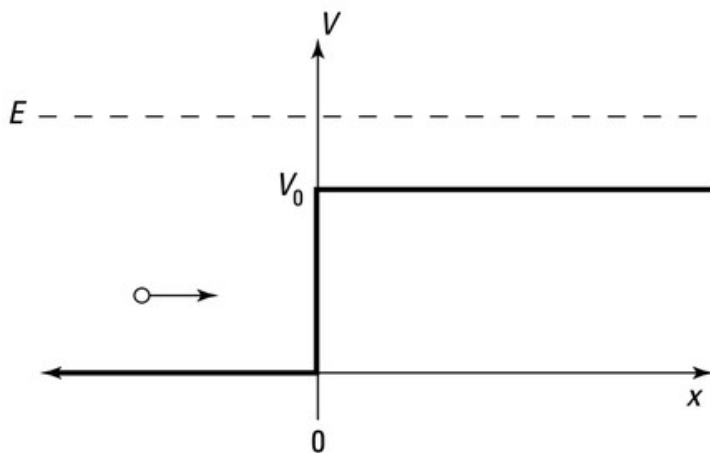


РИСУНОК 8-4.
Потенциальная ступенька, $E > V_0$.

Здесь нужно рассмотреть два случая с точки зрения E , энергии частицы:

- » **$E > V_0$:** В классическом случае, когда $E > V_0$, ожидается, что частица сможет продолжить движение в область $x > 0$.
- » **$E \leq V_0$:** Когда $E \leq V_0$, ожидается, что частица отразится назад и вообще не сможет попасть в область $x > 0$.

Предположим, что частица обладает достаточной энергией

Начнем со случая, когда энергия частицы E больше потенциала V_0 . С точки зрения квантовой физики, найдем уравнение Шрёдингера, следуя первым трем шагам из предыдущего раздела «Нахождение уравнения волновой функции»:

1. Определить координаты для записи уравнения Шрёдингера.
2. Применить конкретные ограничения; упростить, если возможно.
3. Преобразовать уравнение Шрёдингера в разрешимую форму.

- Для области $x < 0$: $\frac{d^2\psi_1}{dx^2}(x) + k_1^2\psi_1(x) = 0$ and $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$
- Для области $x > 0$: $\frac{d^2\psi_2}{dx^2}(x) + k_2^2\psi_2(x) = 0$ and $k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$
- Другими словами, k меняется в зависимости от области, как показано на рисунке 8-5. Это различие основано на величине потенциальной ступеньки V_0 .

4. Решение дифференциальных уравнений для ψ .

Два уравнения из шага 3 представляют собой дифференциальные уравнения второго порядка, в точности такие же, как рассмотренные ранее в этой главе в разделе «Нахождение уравнения волновой функции». Как было показано в шаге 4 того раздела, наиболее общее решение имеет следующий вид:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \text{ where } x < 0$$

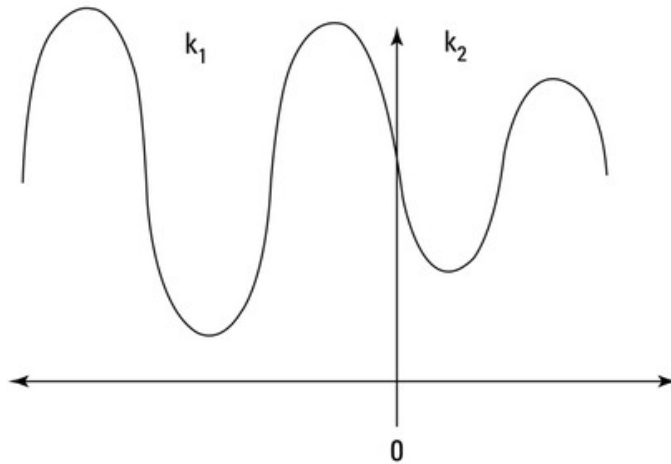


РИСУНОК 8-5.

Значение k по областям, где $E > V_0$.

А для области $x > 0$ получается такое же решение, но с другими коэффициентами, поскольку это другое уравнение:

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}, \text{ где } x > 0$$



ЗАПОМНИ

Важно понимать, что в этих уравнениях e^{ikx} представляет плоские волны, распространяющиеся в положительном направлении оси Ox , а e^{-ikx} представляет плоские волны, распространяющиеся в противоположном направлении оси Ox .

5. Использование граничных условий и нормировки для нахождения констант.

Решения для $\psi(x)$, полученные на шаге 4, означают, что волны могут падать на потенциальную ступеньку слева и либо проходить через нее, либо отражаться. Учитывая такой подход к проблеме, можно заметить, что волна может отражаться только вправо, но не влево, поэтому D должно равняться нулю. Это приводит к следующему виду волнового уравнения:

- Где $x < 0$: $\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$
- Где $x > 0$: $\psi_2(x) = Ce^{ik_2x}$



ЗАПОМНИ

Здесь полезно подумать о том, что означают эти различные члены. Помните, что квантовая волновая функция также является суперпозицией отдельных волновых функций, и именно это демонстрирует структура $\psi_1(x)$. Поскольку она представляет область $x < 0$, это суперпозиция как падающей, так и отраженной волны. Член Ae^{ik_1x} представляет падающую волну, в то время как Be^{-ik_1x} — отраженную волну. Для $x > 0$ волновая функция $\psi_2(x) = Ce^{ik_2x}$ является прошедшей волной, поскольку она представляет ту часть, которая проходит на другую сторону потенциальной ступеньки.

Чтобы найти значения этих констант, я познакомлю вас с новыми математическими инструментами, которые вы будете использовать в расчетах, показанных в следующих двух разделах.

Вычисление вероятности отражения или прохождения

Вы можете рассчитать вероятность того, что частица отразится или пройдет через потенциальную ступеньку, вычислив коэффициенты отражения и прохождения. *Коэффициент отражения* показывает, какая часть волны отражается, а *коэффициент прохождения* — какая часть волны проходит. Как и многие другие понятия классической физики, в квантовом мире эти идеи приобретают странную перспективу.



ПОДСКАЗКА

Падающая волна либо полностью отражается, либо полностью проходит. Это означает, что полная амплитуда падающей волны равна сумме отраженной и прошедшей волн. Следовательно, сумма коэффициентов отражения и прохождения должна равняться 1.

Вы можете вывести эти коэффициенты из плотности тока вероятности $J(x)$, которая через волновую функцию выражается следующим уравнением:

$$J(x) = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} - \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \right]$$

Если J_r — плотность отраженного тока, а J_i — плотность падающего тока, то R , коэффициент отражения, J_t — плотность прошедшего тока и T , коэффициент прохождения, определяются как:

$$R = \frac{J_r}{J_i}$$

$$T = \frac{J_t}{J_i}$$

Теперь нужно вычислить J_r , J_i и J_t . На самом деле это не так сложно. Начнем с J_i . Поскольку падающая часть волны имеет вид $\psi_i(x) = Ae^{ik_1x}$, плотность падающего тока равна:

$$J_i = \frac{i\hbar}{2m} \left[Ae^{ik_1x} \frac{d}{dx} (Ae^{-ik_1x}) - Ae^{-ik_1x} \frac{d}{dx} (Ae^{ik_1x}) \right] = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2$$

J_r и J_t вычисляются аналогично и дают:

$$J_r = \frac{\hbar k_1}{m} |B|^2$$

$$J_t = \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2$$

Таким образом, для коэффициентов отражения R и прохождения T получаем следующие выражения:

$$R = \frac{J_r}{J_i} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

$$T = \frac{J_t}{J_i} = \frac{k_2 |C|^2}{k_1 |A|^2}$$

Надоедливые константы: Поиск A , B и C

Как же определить константы A , B и C ? Это делается так же, как при нахождении коэффициентов для потенциальной ямы бесконечной глубины — с помощью граничных условий (см. предыдущий раздел «Захват частиц в потенциальных ямах бесконечной глубины»). Нельзя просто сказать, что $\psi(x)$ стремится к нулю, поскольку потенциал больше не бесконечен. Вместо этого граничные условия требуют непрерывности $\psi(x)$ и $d\psi(x)/dx$ на границе потенциальной ступеньки. В виде уравнений это записывается как:

$$\left| \begin{array}{l} \gg \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \gg \frac{d\psi_1}{dx}(0) = \frac{d\psi_2}{dx}(0) \end{array} \right.$$

И известно следующее:

$$\left| \begin{array}{l} \gg \text{При } x < 0: \psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \\ \gg \text{При } x > 0: \psi_2(x) = Ce^{ik_2x} \end{array} \right.$$

Подставляя эти выражения и применяя алгебру и исчисление, получаем:

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0) \Rightarrow Ae^{ik_1 \cdot 0} + Be^{ik_1 \cdot 0} = Ce^{ik_2 \cdot 0} \Rightarrow A + B = C \\ \frac{d\psi_1}{dx}(0) &= \frac{d\psi_2}{dx}(0) \Rightarrow \frac{d}{dx}(Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}) = \frac{d}{dx}Ce^{ik_2x} \Rightarrow \\ &\Rightarrow k_1A - k_1B = k_2C \end{aligned}$$

С помощью этих двух уравнений можно выразить B и C через A:

$$\begin{aligned} B &= \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \\ C &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A \end{aligned}$$

Можно было бы нормировать функцию, проинтегрировав вероятность по всем значениям x и приравняв этот интеграл к 1 (подробнее об этом вычислении см. раздел «Нормировка волновой функции» ранее в этой главе). Можно было бы, но в этот раз в этом нет необходимости, поэтому я вас от этого освобождаю.

Здесь не нужно нормировать функцию, поскольку два коэффициента являются отношениями и значение A сократится. В частности, для коэффициентов отражения и прохождения имеются следующие уравнения:

$$\begin{aligned} R &= \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \\ T &= \frac{k_2 |C|^2}{k_1 |A|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \end{aligned}$$



ЗАПОМНИ

Это интересный результат, который противоречит классической физике, согласно которой отражение частиц не должно происходить. Но когда вы смотрите на коэффициент отражения, если $k_1 \neq k_2$, то числитель не равен 0, и отражение частиц возможно. Вы уже получили результат, отличающийся от классического. Частица может отражаться от потенциальной ступеньки. Здесь снова проявляется волновое поведение частицы.

Рассмотрим, что происходит, когда V_0 стремится к нулю. Это означает, что k_1 приближается к k_2 , и R стремится к 0, в то время как T стремится к 1. Чем меньше ступенька потенциальной энергии, тем меньше вероятность отражения и больше вероятность прохождения. Когда $V_0 = 0$, потенциальной ступеньки фактически нет и $k_1 = k_2$. Вы можете провести расчеты, чтобы увидеть, какие доли отражаются и проходят в этом случае.

Случай, когда у частицы недостаточно энергии

Теперь рассмотрим случай, когда $E < V_0$ при наличии потенциальной ступеньки, как показано на рисунке 8-6. В этом случае, согласно классической физике, у частицы недостаточно энергии, чтобы попасть в область $x > 0$. Посмотрим, что об этом говорит квантовая физика.

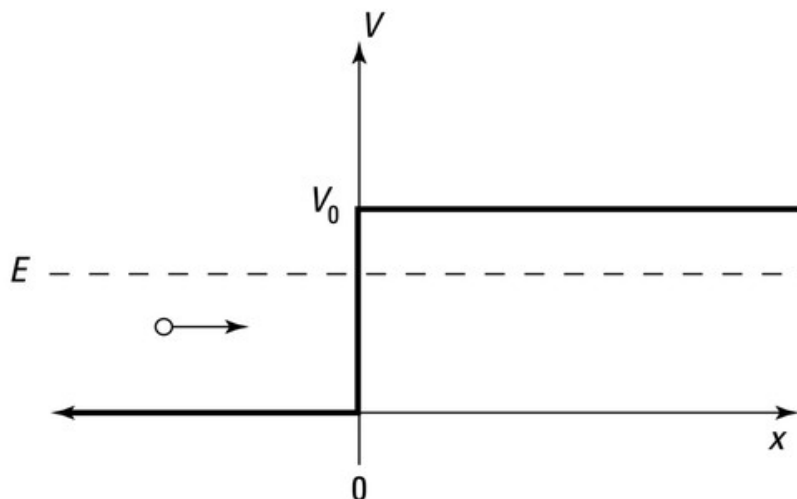


РИСУНОК 8-6.

Потенциальная ступенька, $E < V_0$.

Снова начните вычисления с определения координат (см. рисунок 8-6) и структурирования уравнений так же, как было показано в разделе «Случай, когда у частицы достаточно энергии» ранее в этой главе.

1. Определим координаты для записи уравнения Шрёдингера.
2. Применим конкретные ограничения и упростим, где возможно.
3. Преобразуем уравнение Шрёдингера в разрешимую форму.

Сначала рассмотрим область $x < 0$. Там уравнение Шрёдингера будет выглядеть так:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2}(x) + k_1^2\psi_1(x) = 0$$

$$\text{где } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Забегая немного вперед, к шагу 4, вы знаете решение из предыдущего раздела о потенциальных ступеньках, которое было математически идентичным:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad x < 0$$

А что насчет области $x > 0$? Это другая история, поскольку энергетические соотношения отличаются от предыдущей ситуации. Вот уравнение Шрёдингера из той ситуации:

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}(x) + k^2\psi_2(x) = 0 \quad (\text{где } x > 0)$$

$$\text{где } k^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

Но подождите! В этот раз $E - V_0$ меньше нуля, что сделало бы k мнимым, что физически невозможно. Но $V_0 - E$ было бы положительным и, следовательно, физически возможным. В шаге 3 из списка в разделе «Нахождение уравнения волновой функции» ранее в этой главе я определил k^2 для удобства – в основном чтобы убрать из уравнения множество констант. Этот член хорошо работал с плюсом перед ним. Но нет правила, которое говорит, что k^2 должно быть со знаком плюс, поэтому изменим знак в уравнении Шрёдингера с плюса на минус:

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}(x) - k^2\psi_2(x) = 0 \quad x > 0$$

$$\text{где } k^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

Чтобы этот маневр со сменой знака сработал, учтите особые обстоятельства – ситуацию, где $E < V_0$. Также помните, что эти уравнения применимы только для $x > 0$. Но это нормально, потому что вы уже знаете решение для $x < 0$.



ЗАПОМНИ

4. Решим дифференциальное уравнение для ψ .

Теперь, когда уравнение Шрёдингера приведено к разрешимой форме, вы его решаете. Вот два линейно независимых решения:

$$\psi(x) = Ce^{-k_2x}$$

$$\psi(x) = De^{k_2x}$$

Сложив эти два решения, вы получаете общее решение для волновой функции в этой области:

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}, \quad x > 0$$

5. Используйте граничные условия и нормировку для нахождения констант.

Волновые функции должны быть конечными везде (см. предыдущий раздел «Нормировка волновой функции»). Второй член явно не является конечным при x , стремящемся к бесконечности, поэтому D должно равняться нулю. (Первый член также расходился бы при x , стремящемся к минус бесконечности, но поскольку потенциальная ступенька ограничена областью $x > 0$, это не проблема.) Следовательно, вот решение для $x > 0$:

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} \quad x > 0$$

Таким образом, ваши волновые функции для двух областей:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad x < 0$$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} \quad x > 0$$

В данном случае вы также можете разбить эти две волновые функции на три составляющие, представляющие различные возможные части волновой функции:

» Падающая волновая функция: $\psi_i(x) = Ae^{ik_1x}$

» Отраженная волновая функция: $\psi_r(x) = Be^{-ik_1x}$

» Прошедшая волновая функция: $\psi_t(x) = Ce^{-k_2x}$

Нахождение коэффициентов прохождения и отражения

Теперь вы можете вычислить коэффициенты отражения и прохождения, R и T . Случай $E > V_0$ рассчитывается путем взятия отношений в разделе «Предполагая, что частица имеет достаточно энергии» ранее в этой главе. Вы могли бы проделать всю эту работу снова, но в данной ситуации можно использовать более короткий путь.

Прошедшая волновая функция $\psi_t(x) = Ce^{-k_2x}$ (из предыдущего раздела) не содержит i , поэтому $\psi_t(x)$ полностью вещественна. Вот краткое напоминание о функции плотности прошедшего тока:

$$J_t = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_t(x) \frac{d\psi_t^*(x)}{dx} - \psi_t^*(x) \frac{d\psi_t(x)}{dx} \right]$$

Поскольку $\psi_t(x)$ вещественна, это означает, что комплексно-сопряженная функция будет такой же, как сама функция, что приводит к:

$$J_t = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_t(x) \frac{d\psi_t(x)}{dx} - \psi_t(x) \frac{d\psi_t(x)}{dx} \right]$$

Удобно то, что выражение в скобках равно нулю, поэтому $J_t = 0$. Коэффициент прохождения T основан на J_t (как описано в разделе «Предполагая, что частица имеет достаточно энергии» ранее в этой главе), поэтому вы знаете, что $T = 0$. Поскольку сумма коэффициентов прохождения $R + T = 1$, вы также знаете, что $R = 1$. Волна совсем не проходит. Волна полностью отражается, как и в классическом решении.

Ненулевое решение: обнаружение частицы при $x > 0$

Несмотря на полное отражение волны, между квантовым и классическим решениями существует значительное различие. В квантовом решении у вас действительно есть ненулевая вероятность обнаружить частицу в области $x > 0$. Плотность вероятности для $x > 0$ (представляющая вероятность в этой области) равна:

$$P(x) = |\psi_t(x)|^2$$

Подставляя выражение для прошедшей волновой функции $\psi_t(x)$, получаем:

$$P(x) = |\psi_t(x)|^2 = |C|^2 e^{-2k_2x}$$

Используя следующие граничные условия при $x = 0$ (где две волновые функции совпадают друг с другом), можно выразить C через A :

$$\left| \begin{array}{l} \gg \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \gg \frac{d\psi_1}{dx}(0) = \frac{d\psi_2}{dx}(0) \end{array} \right.$$

Применение граничных условий дает следующее уравнение:

$$P(x) = |C|^2 e^{-2k_2x} = \frac{4k_1^2 |A|^2 e^{-2k_2x}}{k_1^2 + k_2^2}$$

Плотность вероятности действительно быстро падает до нуля при увеличении x , но вблизи $x = 0$ она имеет ненулевое значение. На рисунке 8-7 показано, как выглядит плотность вероятности для случая потенциальной ступеньки при $E < V_0$.

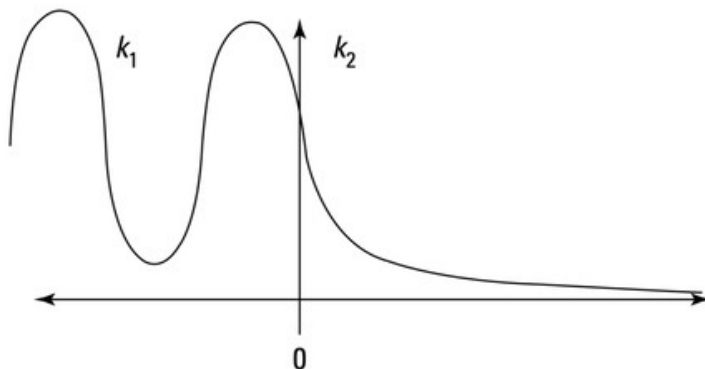


РИСУНОК 8-7.
Значение k по областям, $E < V_0$.

Туннелирование через запрещенную область

В предыдущем разделе я описываю различие между классическими и квантово-механическими решениями, которое связано с тем, где можно обнаружить прошедшие частицы. Например, существует вероятность обнаружения частиц в классически запрещенных областях. В квантовой механике явление, при котором частицы могут проникать в области, куда им классически запрещено входить, называется *квантовым туннелированием*. Туннелирование возможно потому, что в квантовой механике частицы проявляют волновые свойства.

Туннелирование — один из самых захватывающих результатов квантовой физики, и оно происходит из-за распространения волновых функций частиц. Это, конечно, микроскопический эффект — так что не пытайтесь пройти сквозь закрытые двери — но весьма значительный. Среди прочего, туннелирование делает возможным создание работающих транзисторов и интегральных схем.

Столкновение со стеной: частицы и потенциальные барьеры

Что, если частица могла бы пройти через потенциальную ступеньку — то есть, ступенька не простиралась бы до бесконечности, а имела ограниченную протяженность? Тогда мы получили бы *потенциальный барьер*, который выглядит примерно так:

- » $V(x) = 0$, где $x < 0$ или $x > a$
- » $V(x) = V_0$, где $0 \leq x \leq a$

На рисунке 8-8 показано, как выглядит этот потенциальный барьер.

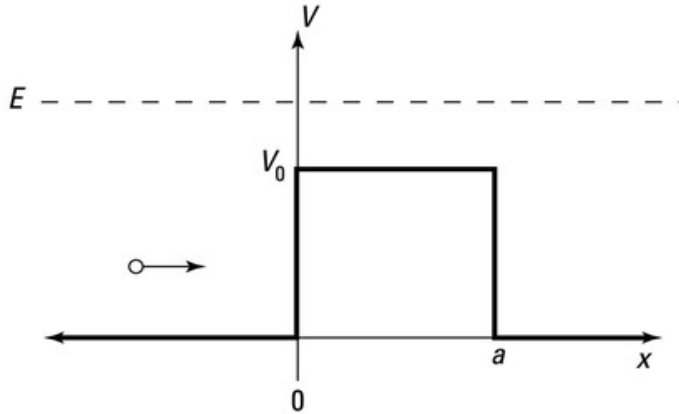


РИСУНОК 8-8.
Потенциальный барьер $E > V_0$.

При решении уравнения Шрёдингера для потенциального барьера необходимо рассмотреть два случая, соответствующих ситуациям, когда энергия частицы больше или меньше потенциального барьера. Другими словами, если E — энергия падающей частицы, то нужно рассмотреть два случая: $E > V_0$ и $E < V_0$.

Прохождение через потенциальные барьеры при $E > V_0$

Вы можете применить те же шаги, что описаны в разделе «Нахождение уравнения волновой функции» ранее в этой главе, чтобы составить и решить уравнение Шрёдингера для обоих случаев. В этом разделе приведены уравнения для случая, когда $E > V_0$.

1. **Определите координаты для записи уравнения Шрёдингера.**
2. **Примените конкретные ограничения; упростите, если возможно.**
3. **Преобразуйте уравнение Шрёдингера в разрешимую форму.**

В этом случае (где $E > V_0$) частица имеет достаточно энергии, чтобы пройти через потенциальный барьер и оказаться в области $x > a$. Вот как выглядит уравнение Шрёдингера:

- Для области $x < 0$: $\frac{d^2\psi_1}{dx^2}(x) + k_1^2\psi_1(x) = 0$, где $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

- Для области $0 \leq x \leq a$: $\frac{d^2\psi_2}{dx^2}(x) + k_2^2\psi_2(x) = 0$, где $k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$
- Для области $x > a$: $\frac{d^2\psi_3}{dx^2}(x) + k_1^2\psi_3(x) = 0$, где $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

4. Решите дифференциальные уравнения для ψ .

Решения для $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ и $\psi_3(x)$ следующие:

- где $x < 0$: $\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$
- где $0 \leq x \leq a$: $\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$
- где $x > a$: $\psi_3(x) = Ee^{ik_1x} + Fe^{-ik_1x}$

Фактически, поскольку в области $x > a$ нет волны, движущейся влево, $F = 0$, поэтому $\psi_3(x) = Ee^{ik_1x}$

5. Используйте граничные условия и нормировку для нахождения констант. Чтобы определить A , B , C , D и E , используются граничные условия при $x = 0$ и $x = a$, которые в данном случае выглядят следующим образом:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\frac{d\psi_1}{dx}(0) = \frac{d\psi_2}{dx}(0)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a)$$

$$\frac{d\psi_2}{dx}(a) = \frac{d\psi_3}{dx}(a)$$

Из этих уравнений получаем:

- $A + B = C + D$
- $ik_1(A - B) = ik_2(C - D)$
- $Ce^{ik_2a} + De^{-ik_2a} = Ee^{ik_1a}$
- $ik_2Ce^{ik_2a} - ik_2De^{-ik_2a} = ik_1Ee^{ik_1a}$

$$E = 4k_1k_2Ae^{-ik_1a} \left[4k_1k_2 \cos(k_2a) - 2i(k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2a) \right]^{-1}$$

Объединяя все эти уравнения, получаем следующее выражение для коэффициента E (это НЕ энергия!) через A :

Теперь определим коэффициент прохождения T , который равен:

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{k_1k_2} \right)^2 \sin^2(k_2a) \right]^{-1}$$



ЗАПОМНИ

Заметим, что когда k_1 стремится к k_2 , T стремится к 1, что и следовало ожидать. (См. обсуждение этих ожиданий в конце предыдущего раздела «Эти надоедливые константы: нахождение A , B и C ».)

А что насчет R , коэффициента отражения? Я избавлю вас от алгебраических выкладок, но вот чему равен R :

$$R = \frac{(k_2^2 - k_1^2) \sin^2(k_2 a)}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)}$$

На рисунке 8-9 показана плотность вероятности $|\psi(x)|^2$ для потенциального барьера при $E > V_0$.

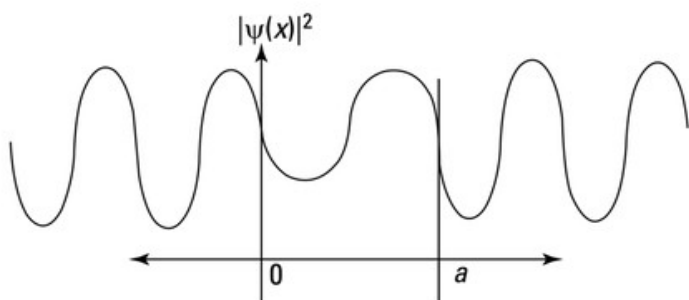


РИСУНОК 8-9.

$|\psi(x)|^2$ для потенциального барьера при $E > V_0$.

Туннелирование через потенциальные барьеры при $E < V_0$

Что происходит, если энергия частицы меньше, чем потенциал барьера? Другими словами, вы сталкиваетесь с ситуацией, показанной на рисунке 8-10.

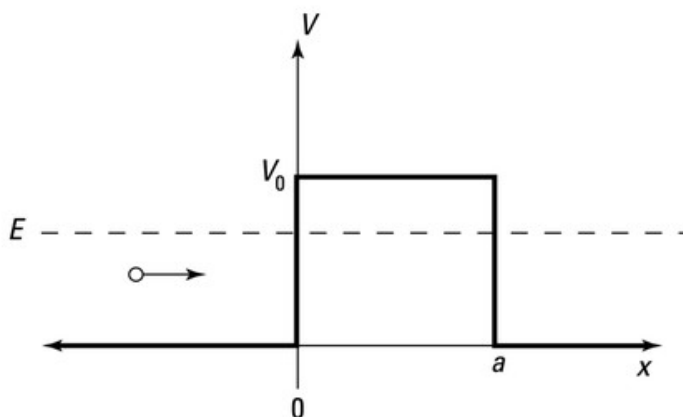


РИСУНОК 8-10.

Потенциальный барьер при $E < V_0$.

Большая часть работы для этой задачи идентична работе из предыдущего раздела, за исключением области самого барьера, $0 \leq x \leq a$.

Уравнение Шрёдингера из шага 3 (из предыдущего раздела) для этой области выглядит так:

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2\psi_2(x) = 0$$

где $k_2^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$

Поскольку $E - V_0$ меньше 0, что сделало бы k мнимым, необходимо применить прием перестановки членов и сделать второй член отрицательным, чтобы получить уравнение без мнимых величин (см. раздел «Предполагая, что у частицы недостаточно энергии»).

Решения для $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ будут идентичны предыдущему разделу, но теперь решение этого дифференциального уравнения является действительным, а не мнимым:

$$\psi_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}, \text{ где } 0 \leq x \leq a$$

Волновая функция осциллирует в областях, где она имеет положительную энергию, $x < 0$ и $x > a$, но является затухающей экспонентой в области $0 \leq x \leq a$. На рисунке 8-11 показана плотность вероятности, $|\psi(x)|^2$.

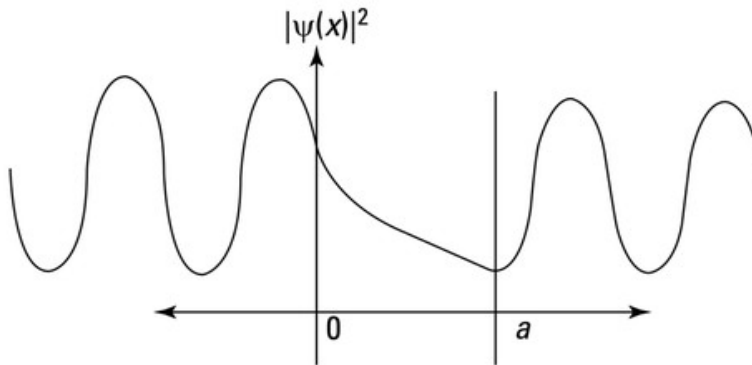


РИСУНОК 8-11.

$|\psi(x)|^2$ для потенциального барьера при $E < V_0$

Как и следовало ожидать, для определения A , B и E используются те же условия непрерывности. А как насчет коэффициентов отражения и прохождения, R и T ? Пропуская значительную часть алгебраических и тригонометрических выкладок, для R и T получаются следующие выражения:

$$R = \frac{4k_1^2 - k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2 \sinh(k_2a)}$$

$$T = \left[\cosh(k_2 a) + \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1^2 k_2^2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \right]^{-1}$$

Несмотря на сложность уравнения, удивительно, что выражение для T может быть ненулевым. С классической точки зрения частицы, не обладающие достаточной энергией, не могут проникнуть в запрещенную зону $0 \leq x \leq a$, поскольку их энергия меньше потенциальной. Но в квантовой физике они могут это сделать! Я объясняю эту странную квантовую особенность в разделе «Туннелирование через запрещенные области» ранее в этой главе.

Несвязанные частицы: решение уравнения Шрёдингера для свободных частиц

В предыдущих примерах этой главы я сосредоточился на частицах, которые каким-то образом ограничены или связаны, взаимодействуя с потенциальной энергией, влияющей на их поведение. Пришло время спустить этих частиц с поводка! Что можно сказать о частицах вне любой потенциальной ямы — то есть о свободных частицах? Во Вселенной можно найти множество частиц, которые ведут себя свободно, и квантовая физика может рассказать о них немало интересного.

1. Определите координаты для записи уравнения Шрёдингера.

Поскольку эта свободная частица может находиться в любой точке Вселенной, координаты не обязательно должны быть определены в какой-то конкретной ориентации. Вот общая форма уравнения Шрёдингера в одном измерении:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

2. Примените конкретные ограничения; упростите, если возможно.

3. Преобразуйте уравнение Шрёдингера в разрешимую форму.

Свободная частица не обладает потенциальной энергией, поэтому она находится в области пространства, где $V(x) = 0$. Если применить это ограничение к уравнению из Шага 1 и перенести член с энергией в левую часть, получим:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - E\psi(x) = 0$$

Это можно переписать как:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k^2 \psi(x) = 0$$

где волновое число k определяется как $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

4. Решите дифференциальное уравнение для ψ .

Общее решение этого уравнения Шрёдингера можно записать как:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

А добавив зависящие от времени элементы, получим следующую волновую функцию с временной зависимостью:

$$\psi(x, t) = A \exp\left(ikx - \frac{iEt}{\hbar}\right) + B \exp\left(-ikx - \frac{iEt}{\hbar}\right)$$

ПРОБЛЕМА НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

При попытке нормировки для свободной частицы волновой функции, зависящей от времени, вы сталкиваетесь с проблемой, когда очень сложно нормировать функцию по всему пространству и времени. Когда вы пытаетесь это сделать, вы понимаете, что существует равномерная плотность вероятности во всем пространстве. Вы вообще не можете определить частицу! Что же здесь происходит?

Это результат формы волновой функции, зависящей от времени, которая использует точное значение волнового числа k — и $p = \hbar k$ и $E = \hbar k^2/2m$. Это уравнение говорит о том, что вы точно знаете E и p . А если вы точно знаете E и p , то принцип неопределенности Гейзенберга (см. главу 3) требует большой неопределенности в x и t . На самом деле x и t полностью не определены! Это не соответствует физической реальности.

5. Используйте граничные условия и нормировку для нахождения констант.

Хотя составление уравнения и его решение может быть технически сложным, настоящая проблема всегда, кажется, возникает на последнем этапе, который включает определение констант в конкретной ситуации. Здесь все точно так же!



ПОДСКАЗКА

Поскольку у нас свободная частица в пространстве, никаких граничных условий не существует. Эта ситуация заметно отличается от предыдущих примеров в этой главе. В данном случае необходимо применить нормировку. Вероятность нахождения частицы где-либо в пространстве должна равняться 1, и это можно найти, проинтегрировав плотность вероятности волновой функции по всему пространству.

К сожалению, интегрирование по всему пространству приведет к расходимости членов (и некоторым другим проблемам, описанным во врезке «Проблема неопределенности Гейзенберга»). Нормировка этой конкретной функции без каких-либо граничных условий, которые бы ее ограничивали, снова потребует новых инструментов, которые я представлю в оставшейся части этой главы.

Получение физической частицы с помощью волнового пакета



ПОДСКАЗКА

Если у вас есть несколько решений уравнения Шрёдингера, любая линейная комбинация этих решений также является решением. В этом и заключается ключ к получению физической частицы: вы складываете различные волновые функции так, чтобы получить волновой пакет, который представляет собой набор волновых функций вида $e^{i(kx-Et/\hbar)}$. Эти волновые функции интерферируют конструктивно в одном месте и деструктивно (обращаются в ноль) во всех остальных местах:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n e^{i\left(\frac{kx-Et}{\hbar}\right)}$$

Обычно это записывается в виде непрерывного интеграла:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k, t) e^{i\left(\frac{kx-Et}{\hbar}\right)} dk$$

Член $\phi(k, t)$ представляет собой амплитуду каждой компонентной волновой функции, и его можно найти с помощью преобразования Фурье уравнения:

$$\phi(k, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) e^{-i\left(\frac{kx-Et}{\hbar}\right)} dx$$

Поскольку $k = p/\hbar$, вы также можете записать уравнения волнового пакета в терминах p , а не k :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p, t) e^{i\left(\frac{px-Et}{\hbar}\right)} dp$$

$$\phi(p, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) e^{-i\left(\frac{px-Et}{\hbar}\right)} dx$$

Возможно, вы спрашиваете себя, что здесь происходит. Похоже, что $\psi(x, t)$ определяется через $\phi(p, t)$, но $\phi(p, t)$ определяется через $\psi(x, t)$. Это выглядит как замкнутый круг.

Ответ заключается в том, что два предыдущих уравнения не являются определениями $\psi(x, t)$ или $\phi(p, t)$ — это просто уравнения, связывающие их между собой. Вы можете свободно выбирать собственную форму волнового пакета — например, вы можете задать форму

$\phi(p, t)$, и $\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k, t) e^{i(kx-Et/\hbar)} dk$ тогда позволит вам найти $\psi(x, t)$.

Разбираем пример с гауссовым пакетом

Давайте рассмотрим конкретный пример, выбрав реальную форму волнового пакета. Возьмем так называемый гауссов волновой пакет — показанный на рисунке 8-12 — который локализован в одном месте и равен нулю в остальных.

Для этого волнового пакета можно выбрать амплитуду $\phi(k)$:

$$\phi(k) = A \exp\left[\frac{-a^2(k-k_0)^2}{4}\right]$$

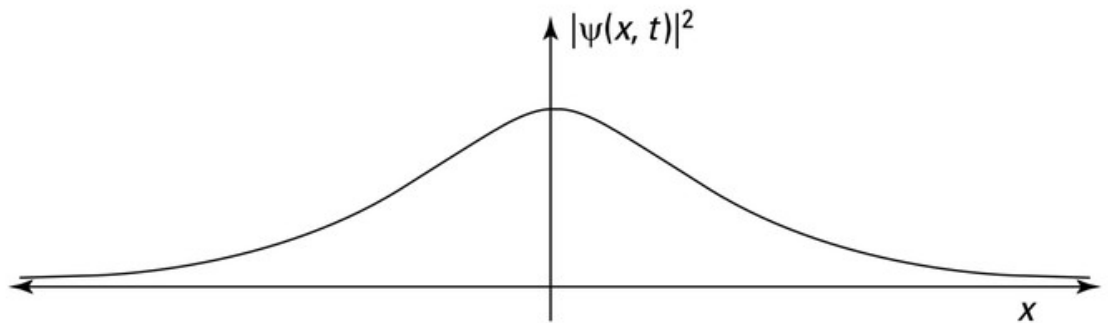


РИСУНОК 8-12.

Гауссов волновой пакет.

Начнем с нормировки $\phi(k)$, чтобы определить значение A . Вот как это делается:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(k)|^2 dk$$

Подставляя $\phi(k)$, получаем уравнение:

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[\frac{-a^2}{2}(k - k_0)^2\right] dk$$

Вычисляя интеграл (то есть находя его в математических таблицах), получаем:

$$1 = |A|^2 \left[\frac{2\pi}{a^2} \right]^{1/2}$$

Следовательно, $A = \left[\frac{a^2}{2\pi} \right]^{1/4}$.

Итак, вот наша волновая функция:

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \left[\frac{a^2}{2\pi} \right]^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[\frac{-a^2(k - k_0)^2}{4}\right] e^{ikx} dk$$

Вычислив этот небольшой интеграл, получаем:

$$\psi(x) = \left[\frac{2}{\pi a^2} \right]^{1/4} \exp\left[\frac{-x^2}{a^2}\right] e^{ik_0 x}$$

Это и есть волновая функция для гауссова волнового пакета (**Примечание:** Множитель $\exp[-x^2/a^2]$ — это гауссова часть, которая придает волновому пакету характерную форму, показанную на рисунке 8-12) — и она уже нормирована.

Хотите проверить волновую функцию в действии? Помните, что основная роль волновой функции — описывать плотность вероятности нахождения частицы в определенном месте. Теперь мы можем использовать эту функцию волнового пакета, чтобы определить вероятность того, что частица будет находиться, скажем, в области $0 \leq x \leq a/2$. Вероятность равна:

$$\int_0^{a/2} |\psi(x)|^2 dx = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_0^{a/2} \exp\left(\frac{-2x^2}{a^2}\right) dx = \frac{1}{3}$$

Таким образом, вероятность того, что частица будет находиться в области $0 \leq x \leq a/2$, равна $1/3$, что примерно соответствует вероятности нахождения в пределах одного стандартного отклонения от среднего значения в гауссовом распределении. То есть расстояние $a/2$ примерно равно стандартному отклонению в данном случае. Круто! (Почти как будто это было выбрано не случайно.)

- » Гамильтонианы: Взгляд на полную энергию
- » Применение операторов рождения и уничтожения к энергетическим уровням
- » Составление уравнений энергетических состояний
- » Решение для собственных состояний

Глава 9

Туда-обратно с гармоническими осцилляторами

Гармонические осцилляторы — это физические системы с периодическим движением, такие как предметы, колеблющиеся на пружинах или качающиеся маятники. Вы, вероятно, уже знакомы с задачами о гармонических осцилляторах в макроскопическом мире, но теперь мы переходим к микроскопическому уровню. Многие физические системы — например, атомы в кристаллической структуре — можно аппроксимировать с помощью гармонических осцилляторов.

В этой главе вы увидите точные решения задач о гармоническом осцилляторе, а также вычислительные методы их решения. Я покажу вам, как гармонические осцилляторы могут быть интерпретированы в различных энергетических состояниях, и решу их, используя обозначения Дирака, бра и кет.

Примечание: Прежде чем погрузиться в эту главу, вам может быть полезно просмотреть главу 2, которая охватывает классическое периодическое движение, а также некоторые ключевые понятия тригонометрии. Эта глава предполагает знакомство с этими концептами, а также с математическим анализом, поскольку я использую его для преобразования некоторых уравнений периодического движения. Работа с уравнениями состояния требует знания линейной алгебры. Кроме того, для решения уравнения Шрёдингера (рассматриваемого в главе 7) вам необходимо знакомство с дифференциальными уравнениями.

Разбираемся с гамильтонианом гармонического осциллятора

Итак, пора начать говорить о гамильтонианах (и я не имею в виду поклонников отца-основателя США Александра Гамильтона). *Гамильтониан* — это оператор, который помогает найти энергетические уровни системы.

Классический подход к гармоническим колебаниям

Вы, возможно, помните два основных случая гармонического движения из классической физики (и главы 2): простой маятник и массу, подвешенную на пружине. Аналогичные гармонические соотношения также применяются при интерпретации взаимосвязей между зарядом, током, напряжением и другими электрическими характеристиками. И, конечно же, периодическое движение волн проявляется в гидродинамике и акустике.

Благодаря повторяемости этого математического поведения гармонические колебания невероятно хорошо изучены в классической физике, и я могу использовать это понимание как трамплин для представления квантовых гармонических осцилляторов.

Итак, что мы знаем из классической физики? Сила, действующая на объект при гармонических колебаниях, определяется *законом Гука*:

$$F = -kx$$

В этом уравнении k — это коэффициент жесткости пружины, измеряемый в ньютонах на метр, а x — смещение в метрах. Коэффициент жесткости является характеристикой колеблющейся физической структуры. В случае пружины он отражает то, насколько пружина сопротивляется растяжению. Мягкая пружина будет иметь низкое значение k , в то время как очень жесткая пружина будет иметь большее значение k , поскольку сила, необходимая для растяжения мягкой пружины, меньше силы, необходимой для растяжения жесткой пружины.



ЗАПОМНИ

Ключевой момент здесь заключается в том, что возвращающая сила, действующая на объект, совершающий гармонические колебания, пропорциональна его смещению. Другими словами, чем сильнее вы растягиваете пружину, тем сильнее она тянет обратно при отпускании.

Поскольку $F = ma$ (согласно второму закону Ньютона, как обсуждалось в главе 2), где m — масса частицы, совершающей гармониче-

ские колебания, а a — ее мгновенное ускорение, можно подставить F и записать это уравнение как:

$$ma + kx = 0$$

Теперь применим немного математического анализа, поскольку мгновенное ускорение (a) — это вторая производная смещения (x) по времени (t):

$$a = \frac{d^2x}{dt^2}$$

Подставляя выражение для a , можно переписать уравнение силы из второго закона Ньютона как:

$$ma + kx = m \frac{d^2x}{dt^2} + kx = 0$$

Разделив на массу частицы, получаем:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{kx}{m} = \frac{0}{m}$$

Теперь можно сделать небольшую подстановку, чтобы уменьшить количество переменных в получившемся дифференциальном уравнении. Если принять $k/m = \omega^2$ (где ω — угловая частота), получаем:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0$$

Благодаря чудесам математического анализа можно решить это дифференциальное уравнение второго порядка для x , где A и B — константы:

$$x = A \sin \omega t + B \cos \omega t$$



ЗАПОМНИ

Решение имеет колебательный характер, поскольку содержит синусы и косинусы, представляющие периодические функции. До этого момента мы даже не затрагивали микроскопический уровень, где необходимо начать применять квантовые правила.

Понимание полной энергии в квантовых колебаниях

Теперь рассмотрим гармонические осцилляторы с точки зрения квантовой физики. Соответствующие концепции описывают не маятники или массы на пружинах — квантовый осциллятор представляет собой

любую квантовую систему, в которой сила пропорциональна величине смещения от точки устойчивого равновесия. Оказывается, что множество микроскопических систем можно моделировать таким образом, поэтому система квантового осциллятора становится одной из важнейших моделей во всей квантовой физике!

Применение гамильтониана

Оператор Гамильтона (H) (см. главу 7, где я представляю оператор Гамильтона) дает *полную энергию системы*, то есть сумму кинетической энергии (KE) и потенциальной энергии (PE), поэтому гамильтониан можно разбить на эти две составляющие: $H = KE + PE$.

Для гармонического осциллятора эти энергии равны следующим значениям.

- » Кинетическая энергия в любой момент времени, где p – импульс частицы, а m – ее масса:

$$KE = \frac{p^2}{2m}$$

- » Потенциальная энергия частицы, где k – коэффициент жесткости пружины, x – смещение, а с учетом угловой частоты $\omega^2 = \frac{k}{m}$, дает:

$$PE = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

В квантовой физике вместо отдельных физических величин используются операторы, действующие на матрицы значений. Это означает, что можно записать гамильтониан, сложив кинетическую и потенциальную энергию:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

где P и X — операторы импульса и положения.

Применение гамильтониана к собственным состояниям

Применяя оператор Гамильтона к различным *собственным состояниям* (где одна из переменных системы имеет определенное фиксированное значение — подробнее о собственных состояниях см. в главе 7), $|\psi\rangle$, гармонического осциллятора, получаем полную энергию E этих собственных состояний:

$$\hat{H}|\psi\rangle = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 |\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Теперь задача сводится к нахождению собственных состояний и собственных значений. Однако это оказывается непростой задачей. В отличие от потенциала $V(x)$, рассмотренного в главе 8, $V(x)$ для гармонического осциллятора более сложный, так как зависит от x^2 . Причина, по которой мы начали с потенциальных ям (в главе 8), заключается в том, что они особенно просты!

Чтобы сделать эти уравнения гармонического осциллятора разрешимыми, нужно проявить изобретательность. Способ решения задач с гармоническим осциллятором в квантовой физике заключается в использовании операторной алгебры — то есть, вводится новый набор операторов. О них пойдет речь в следующем разделе.

Рождение и уничтожение: знакомство с операторами гармонического осциллятора

Квантовая физика по сути была построена как набор математических приемов для работы с матрицами, представляющими квантовые величины. Можно было преобразовывать эти наборы значений и получать числа, которые затем можно было проверить экспериментально. На протяжении более века эксперименты неоднократно подтверждали результаты этих математических приемов, что говорит об их работоспособности.

Один полезный математический прием, который хорошо работает в квантовой физике, позволяет преобразовать более сложное уравнение Гамильтона в более управляемую форму. Этот прием заключается во введении двух операторов с монументальными названиями:

- » **Оператор рождения ($a^\dagger$)** повышает энергию собственного состояния на один уровень. Так, например, если гармонический осциллятор находится на четвертом энергетическом уровне, оператор рождения поднимает его на пятый уровень.
- » **Оператор уничтожения (a)** понижает энергию собственного состояния на один уровень (в противоположность оператору рождения).



ПОДСКАЗКА

Операторы рождения и уничтожения позволяют физикам находить энергетический спектр без трудоемкого решения задачи для конкретных собственных состояний. После нахождения одного из состояний можно использовать эти операторы для определения энергий соседних состояний.

Обычно проще всего найти основное состояние, $n = 0$. Можно было бы подумать, что основное состояние соответствует нулевой энергии, но вспомните, как работает квантовая механика! В квантовом мире редко встречаются полностью неподвижные объекты. Практически сразу после создания матричной механики квантовой теории Вернер Гейзенберг осознал, что в квантовой системе всегда существует неопределенность в положении и импульсе. (Принцип неопределенности Гейзенберга более подробно рассматривается в главе 3.)



ЗАПОМНИ

В квантовой механике ничто никогда не находится в полном покое, поэтому квантовый гармонический осциллятор всегда будет совершать некоторые движения. Эти квантовые колебания означают, что энергия основного состояния E_0 при $n = 0$ никогда не будет в точности равна нулю — хотя это и будет состояние с минимально возможной энергией. Именно поэтому оно называется основным состоянием.

Следите за p и q : получение решения для энергетических состояний

Энергетический спектр квантового гармонического осциллятора можно найти, выполнив следующие шаги:

1. Определите операторы p и q .

Сначала введем два новых безразмерных оператора, p и q , которые связаны с операторами P (импульса) и X (координаты) следующим образом:

$$\bullet \quad p = \frac{P}{\sqrt{m\hbar\omega}}$$

$$\bullet \quad q = X\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

В линейной алгебре часто используют p и q при преобразовании уравнений, и, к сожалению, это создает путаницу, когда они используются наряду с переменными, которые физики используют для обозначения импульса. Оператор p использует оператор импульса P , но сам оператор p не является оператором импульса. И он также не является переменной для импульса.

2. Определите a и $a^\dagger$ через p и q .

Вы используете эти два новых оператора, p и q , как основу для оператора уничтожения a и оператора рождения $a^\dagger$:

- $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip)$
- $a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip)$

3. Перепишите гамильтониан через a и $a^\dagger$.

Вот что получается (я избавлю вас от всех промежуточных шагов):

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

4. Определите оператор числа частиц N .

Квантовые физики здесь увлеклись созданием новых операторов, даже дав название произведению $a^\dagger a$: *оператор числа частиц N* . Таким образом, гамильтониан можно записать как:

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

Оператор N возвращает номер энергетического уровня гармонического осциллятора. Если обозначить собственные состояния N как $|n\rangle$, получаем следующее выражение, где n – номер n -го состояния:

$$N|n\rangle = n|n\rangle$$

5. Найдите E_n .

Поскольку $H = \hbar\omega(N + 1/2)$, и поскольку $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, подставляя первое уравнение во второе, получаем:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2 \dots$$

Удивительно, но это дает вам собственные значения энергии n -го состояния квантового гармонического осциллятора. Вот энергетические состояния:

» Энергия основного состояния соответствует $n = 0$:

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

» Первое возбужденное состояние:

$$E_1 = \frac{3}{2} \hbar\omega$$

» Второе возбужденное состояние имеет энергию:

$$E_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega$$

И так далее. То есть энергетические уровни дискретны и невырождены (не разделяются никакими двумя состояниями). Таким образом, энергетический спектр состоит из равноотстоящих полос.

Нахождение собственных состояний

Когда у вас есть *собственные состояния* (решения для энергии; подробнее о собственных состояниях читайте в главе 7), вы можете определить допустимые состояния системы и относительную вероятность того, что система будет находиться в любом из этих состояний.

Применяя коммутатор операторов (см. главу 7) к a и $a^\dagger$, получаем следующее:

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2} [q + ip, q - ip]$$

Это равно:

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2} [q + ip, q - ip] = -i [q, p]$$

Это уравнение сводится к $[a, a^\dagger] = 1$. И, объединяя это уравнение с $H = \hbar \omega \left(N + \frac{1}{2} \right)$, получаем $[a, H] = \hbar \omega a$ и $[a^\dagger, H] = -\hbar \omega a^\dagger$.

Нахождение энергии состояния $a|n\rangle$

Хорошо, имея соотношения для коммутаторов, можно двигаться дальше. Следуйте этим шагам:

1. Применим коммутатор.

Рассмотрим случай, когда энергия состояния $|n\rangle$ равна E_n . Какова энергия состояния $a|n\rangle$? Чтобы найти это, перепишем коммутатор $[a, H] = \hbar \omega a$ в виде $Ha = aH - \hbar \omega a$

Если не сразу понятно, как перейти от коммутатора к этой конечной форме, можно применить определение коммутатора $[A, B] = AB - BA$:

$$\begin{aligned}[a, H] &= \hbar\omega a \\ aH - Ha &= \hbar\omega a \\ Ha &= aH - \hbar\omega a\end{aligned}$$

Примечание: Эта форма уравнения используется на следующем шаге при применении гамильтониана к оператору уничтожения.

2. Применяем гамильтониан.

Теперь используйте эту версию, чтобы записать гамильтониан для $a|n\rangle$ и применить преобразование из Шага 1 следующим образом:

$$\begin{aligned}Ha|n\rangle &= (aH - \hbar\omega a)|n\rangle \\ &= (E_n - \hbar\omega)a|n\rangle\end{aligned}$$



ЗАПОМНИ

Таким образом, $a|n\rangle$ также является собственным состоянием гармонического осциллятора с энергией $E_n - \hbar\omega$, не E_n . Именно поэтому a называется оператором уничтожения или понижающим оператором: он понижает энергетический уровень собственного состояния гармонического осциллятора на один уровень.

Нахождение энергии $a^\dagger|n\rangle$

Итак, каков энергетический уровень $a^\dagger|n\rangle$ — оператора рождения? Выполните следующие шаги, чтобы это выяснить:

1. Применяем коммутатор оператора рождения.

Для оператора рождения коммутатор $[a^\dagger, H] = -\hbar\omega a^\dagger$, что эквивалентно $a^\dagger H - Ha^\dagger = -\hbar\omega a^\dagger$ и $Ha^\dagger = a^\dagger H + \hbar\omega a^\dagger$.

2. Применяем гамильтониан к оператору рождения.

Теперь, когда у вас есть уравнение из Шага 1, вы применяете гамильтониан к оператору рождения, действующему на вектор состояния:

$$\begin{aligned}Ha^\dagger|n\rangle &= (a^\dagger H + \hbar\omega a^\dagger)|n\rangle \\ &= (E_n + \hbar\omega)a^\dagger|n\rangle\end{aligned}$$



ЗАПОМНИ

Это означает, что $a^\dagger|n\rangle$ является собственным состоянием гармонического осциллятора с энергией $E_n + \hbar\omega$, а не просто E_n — то есть оператор $a^\dagger$ повышает энергетический уровень собственного состояния гармонического осциллятора на один уровень.

Прямой вывод операторов a и $a^\dagger$

В предыдущем разделе вы узнали, что $H(a|n\rangle) = (E_n - \hbar\omega)(a|n\rangle)$ и $H(a^\dagger|n\rangle) = (E_n + \hbar\omega)(a^\dagger|n\rangle)$. Вы можете вывести операторы уничтожения (понижения) и рождения (повышения) напрямую, применяя операторы к текущему вектору состояния. В результате вы получаете новый вектор состояния, либо пониженный (для оператора уничтожения/понижения a), либо повышенный (для оператора рождения/повышения $a^\dagger$).

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= C|n-1\rangle \\ a^\dagger|n\rangle &= D|n+1\rangle \end{aligned}$$

C и D — положительные константы, но чему они равны? Состояния $|n-1\rangle$ и $|n+1\rangle$ должны быть нормированы, что означает $\langle n-1|n-1\rangle = \langle n+1|n+1\rangle = 1$. (См. Главу 8 для информации о нормировке волновой функции.) Итак, рассмотрим величину с величиной C :

$$\begin{aligned} (\langle n|a^\dagger)(a|n\rangle) &= C^2 \langle n-1|n-1\rangle \\ (\langle n|a^\dagger)(a|n\rangle) &= C^2 \\ \langle n|a^\dagger a|n\rangle &= C^2 \end{aligned}$$

Но вы также знаете, что $a^\dagger a = N$, оператор уровня энергии, поэтому получаете следующее уравнение:

$$\langle n|N|n\rangle = C^2$$

$N|n\rangle = n|n\rangle$, где n — уровень энергии, поэтому

$$n \langle n|n\rangle = C^2$$

Однако $\langle n|n\rangle = 1$, поскольку состояние уже нормировано, поэтому вы можете найти C :

$$\begin{aligned} n = C^2 &\rightarrow \sqrt{n} = C \\ a|n\rangle = C|n-1\rangle &\rightarrow a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \end{aligned}$$



ЗАПОМНИ

Другими словами, применение оператора понижения a к собственным состояниям гармонического осциллятора сводится к умножению на константу, определяемую энергетическим состоянием.

А что насчет оператора повышения $a^\dagger$? Аналогичные рассуждения показывают, что он также умножает на константу, определяемую энергетическим состоянием. Вот это уравнение:

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

К этому моменту вы уже знаете, каковы собственные значения энергии и как операторы повышения и понижения влияют на собственные состояния гармонического осциллятора. Вы достигли значительного прогресса, используя операторы a и $a^\dagger$ вместо попыток решить уравнение Шрёдингера.

Нахождение собственных состояний энергии гармонического осциллятора

Прелесть использования операторов a и $a^\dagger$ в том, что, имея основное состояние $|0\rangle$, эти операторы позволяют найти все последующие энергетические состояния. Если вы хотите найти возбужденное состояние гармонического осциллятора, вы можете начать с основного состояния $|0\rangle$ и применить оператор повышения $a^\dagger$. Например, вы можете сделать следующее:

$$\begin{aligned} \gg |1\rangle &= a^\dagger |0\rangle = |1\rangle \\ \gg |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} (a^\dagger)^2 |0\rangle \\ \gg |3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} a^\dagger |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}} (a^\dagger)^3 |0\rangle \end{aligned}$$

И так далее. В общем случае имеем соотношение:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle$$

Работа в координатном представлении

Это уравнение хорошо настолько, насколько оно применимо, но вам нужно найти $\langle x|0\rangle = \psi_0(x)$ (собственную функцию основного состояния). Чтобы сделать это, обратитесь к главе 8 для уравнения волновой функции и следуйте этим шагам:

1. Определите координаты для записи уравнения Шрёдингера.

У вас уже есть несколько уравнений для работы. Эти уравнения используют оператор линейного импульса P и оператор положения X . Поскольку вы хотите работать с дифференциальным уравнением второго порядка относительно положения x , вам нужно работать полностью в координатном представлении как базисе.

1а. Запишите оператор q в координатном представлении.

Оператор q уже находится в координатном представлении (см. раздел «Следите за своими p и q : Получение уравнений энергетических

состояний» ранее в этой главе), поэтому здесь дополнительной работы не требуется.

1b. Запишите оператор p в координатном представлении.

Оператор p определяется как:

$$p = \frac{P}{\sqrt{m\hbar\omega}}$$

Поскольку $P = -i\hbar \frac{d}{dx}$ (как было введено в главе 7), можно записать:

$$p = \frac{-i\hbar}{\sqrt{m\hbar\omega}} \frac{d}{dx} = -i \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx}$$

Теперь у нас есть уравнение с оператором p , полностью выраженным через x .

При записи $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, это становится:

$$p = \frac{-i\hbar}{\sqrt{m\hbar\omega}} \frac{d}{dx} = -ix_0 \frac{d}{dx}$$

1c. Запишите оператор a в координатном представлении.

Хорошо, что насчет оператора a ? Можно использовать определения p и q , чтобы получить оператор a :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip)$$

$$q = X \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = X/x_0$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{X}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right) = \frac{1}{x_0 \sqrt{2}} \left(X + x_0^2 \frac{d}{dx} \right)$$

1d. Повторите шаг 1c для оператора понижения $a^\dagger$.

Получается следующее:

$$a^\dagger = \frac{1}{x_0 \sqrt{2}} \left(X - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)$$

Наличие операторов повышения и понижения в координатном представлении означает, что их можно использовать для поиска конкретных векторов состояния, начиная с основного состояния. Использование основного состояния позволяет записать уравнение Шрёдингера для волновой функции.

2. Применить конкретные ограничения. Упростить, если возможно.

Вы хотите решить задачу для основного состояния в координатном представлении, поэтому вам понадобится еще один из тех хитроумных математических приемов, которыми славится квантовая физика.

2a. Примените понижающий оператор a к основному состоянию.

Не существует энергетического состояния ниже основного, поэтому понижение основного состояния должно давать 0. Это записывается как:

$$a|0\rangle = 0$$

А применение бра $\langle x|$ дает $\langle x|a|0\rangle = 0$.

Хитрость заключается в том, что применение понижающего оператора к основному состоянию дает вам дифференциальное уравнение, правая часть которого равна нулю... также известное как *однородное дифференциальное уравнение*.

2b. Запишите однородное дифференциальное уравнение.

Подставьте выражение для a :

$$\begin{aligned}\frac{1}{x_0\sqrt{2}}\left(x + x_0^2 \frac{d}{dx}\right)\psi_0(x) &= 0 \\ \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\left(x\psi_0(x) + x_0^2 \frac{d\psi_0(x)}{dx}\right) &= 0\end{aligned}$$

Теперь у вас есть исходная форма уравнения Шрёдингера, с которой можно работать в шагах 3 и 4.

3. Преобразуйте уравнение Шрёдингера в разрешимую форму.

4. Решите дифференциальное уравнение для ψ .

Умножая обе части на $x_0\sqrt{2}$ и решая получившееся дифференциальное уравнение, получаем:

$$\begin{aligned}x\psi_0(x) + x_0^2 \frac{d\psi_0(x)}{dx} &= 0 \\ \frac{d\psi_0(x)}{dx} &= \frac{-x\psi_0(x)}{x_0^2} \\ \psi_0(x) &= A \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)\end{aligned}$$

Полученное уравнение представляет собой функцию Гаусса, поэтому основное состояние квантового гармонического осциллятора описывается гауссовой кривой, как показано на рисунке 9-1. Это логично, поскольку это простейшее колебательное состояние системы с единственным колебанием. Состояния с более высокой энергией будут иметь более сложные колебания. (Подробнее о функциях Гаусса можно узнать в последнем разделе главы 8.)

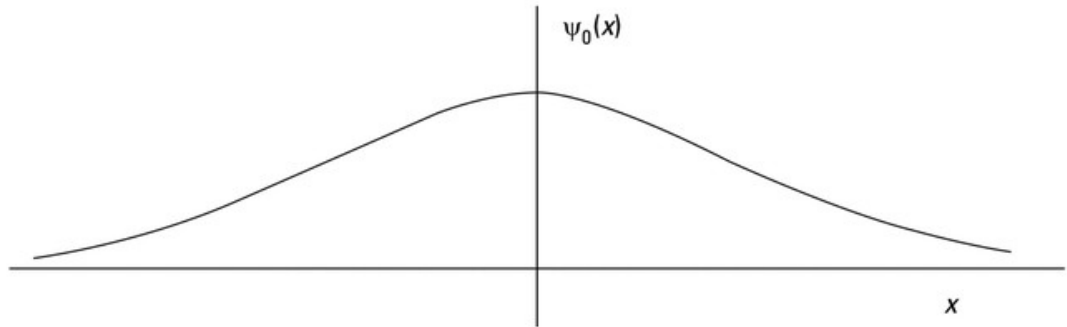


РИСУНОК 9-1.

Основное состояние квантового гармонического осциллятора.

5. Используем граничные условия и нормировку для нахождения констант.

Одной из интересующих нас величин в уравнении основного состояния из Шага 4 является амплитуда A . Поскольку волновые функции должны быть нормированы, приравняем интеграл, представляющий вероятность, к единице и выполним необходимые шаги для нахождения A .

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx \\
 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left| A \exp\left(-x^2/2x_0^2\right) \right|^2 dx \\
 1 &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(\exp\left(-x^2/2x_0^2\right) \right)^2 dx \\
 1 &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-x^2/x_0^2\right) dx \\
 1 &= A^2 \sqrt{\pi} x_0 \\
 A &= \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{x_0}}
 \end{aligned}$$

При подстановке A в однородное дифференциальное уравнение получаем точную волновую функцию основного состояния квантового гармонического осциллятора:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{x_0}} \exp\left(-x^2/2x_0^2\right)$$

Немного возбуждения: поиск первого возбужденного состояния

Теперь, когда у нас есть основное состояние (из предыдущего раздела), мы можем двигаться вверх для нахождения более возбужденных (и будоражащих!) состояний. Начнем с первого возбужденного состоя-

ния $\psi_1(x)$. Для этого расчета нам не нужно возвращаться к решению волновой функции с самого начала. Мы знаем основное состояние, поэтому можем перейти к первому возбужденному состоянию, просто используя оператор повышения (который вы узнали в разделе «Рождение и уничтожение: Знакомство с операторами гармонического осциллятора» ранее в этой главе)!

Волновую функцию первого возбужденного состояния можно записать как $\psi_1(x) = \langle x|1\rangle$ и $|1\rangle = a^\dagger|0\rangle$, поэтому $\psi_1(x) = \langle x|a^\dagger|0\rangle$. И мы знаем, что $a^\dagger$ имеет вид:

$$a^\dagger = \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\left(X - x_0^2 \frac{d}{dx}\right)$$

Следовательно, $\psi_1(x) = \langle x|a^\dagger|0\rangle$ становится:

$$\begin{aligned}\langle x|a^\dagger|0\rangle &= \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\langle x|\left(X - x_0^2 \frac{d}{dx}\right)|0\rangle = \\ &= \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\left(X - x_0^2 \frac{d}{dx}\right)\langle x|0\rangle\end{aligned}$$

И поскольку $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$, получаем следующее уравнение:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\left(X - x_0^2 \frac{d}{dx}\right)\psi_0(x) = \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\left(x - x_0^2 \frac{(-x)}{x_0^2}\right)\psi_0(x) = \\ &= \frac{\sqrt{2}}{x_0}x\psi_0(x)\end{aligned}$$

Мы также знаем из расчетов в предыдущем разделе:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{x_0}}\exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

Следовательно,

$$\psi_1(x) = \frac{\sqrt{2}}{x_0}x\psi_0(x) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{x_0^3}}x\exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

На рисунке 9-2 показан график первого возбужденного состояния, где кривая имеет один узел (пересечение оси x). Сравнивая это с основным состоянием, вы можете предположить, как могут выглядеть более высокие возбужденные состояния, но стоит проверить это, чтобы знать наверняка.

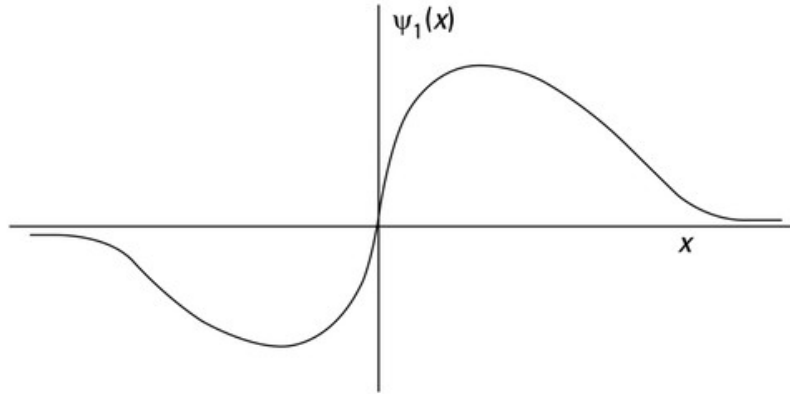


РИСУНОК 9-2.

Первое возбужденное состояние квантового гармонического осциллятора.

Поиск второго возбужденного состояния

Хорошо, а как насчет других возбужденных состояний? Опять же, вы продолжаете повторять процесс применения повышающего оператора, как в этом уравнении:

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \left\langle x \left| (a^\dagger)^2 \right| 0 \right\rangle$$

Здесь я просто забегаю вперед. После подстановки $a^\dagger$, уравнение для волновой функции второго возбужденного состояния принимает вид:

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \frac{1}{2x_0^2} \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x)$$

Использование полиномов Эрмита для нахождения любого возбужденного состояния

Волновую функцию можно обобщить следующим образом:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{2^n n!}} \frac{1}{x_0^{n+1/2}} \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)^n \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

Для решения этого общего дифференциального уравнения используются полиномы Эрмита, изобретенные Симоном Лапласом в 1810 году, задолго до появления квантовой физики. $H_n(x)$ — это полином Эрмита n -й степени. Математики уже проделали работу по вычислению полиномов Эрмита, поэтому их можно найти в таблицах функций. Оказывается, волновые функции для квантовомеханических гармонических осцилляторов можно выразить следующим образом, используя полиномы Эрмита $H_n(x)$:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{2^n n!} x_0} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

где

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

И вы можете использовать это выражение для получения волновой функции квантовомеханического гармонического осциллятора в любом возбужденном состоянии n .

Вы можете увидеть, как выглядит $\psi_2(x)$ на рисунке 9-3; обратите внимание, что кривая здесь имеет два узла — в общем случае, $\psi_n(x)$ для гармонического осциллятора будет иметь n узлов.

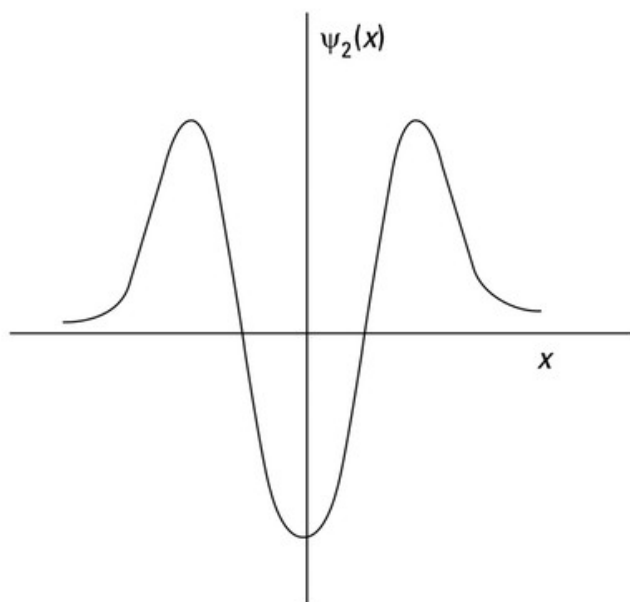


РИСУНОК 9-3.

Второе возбужденное состояние квантового гармонического осциллятора.

Проверка реальности: подставляем числа

В предыдущем разделе вы получили $\psi_n(x)$, а в разделе «Следите за p и q : Получаем уравнения энергетических состояний» вы нашли E_n , так что теперь вы разбираетесь в гармонических осцилляторах. Теперь рассмотрим реальный пример, чтобы увидеть, как можно использовать эти уравнения.

Допустим, у вас есть протон, совершающий гармонические колебания с $\omega = 4,58 \times 10^{21} \text{ сек}^{-1}$, как показано на рисунке 9-4.

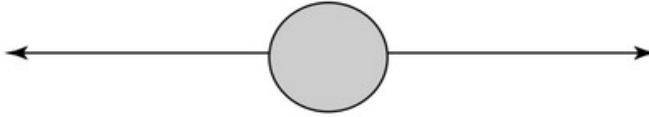


РИСУНОК 9-4.

Протон, совершающий гармонические колебания.

Каковы различные энергетические уровни протона? Вы знаете, что в общем случае:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \text{ где } n = 0, 1, 2, \dots$$

Итак, вот энергии протона в мегаэлектронвольтах (МэВ):

$$\begin{aligned} \gg E_0 &= \frac{\hbar \omega}{2} = 1,51 \text{ MeV} \\ \gg E_1 &= \frac{3\hbar \omega}{2} = 4,52 \text{ MeV} \\ \gg E_2 &= \frac{5\hbar \omega}{2} = 7,54 \text{ MeV} \\ \gg E_3 &= \frac{7\hbar \omega}{2} = 10,6 \text{ MeV} \end{aligned}$$

И так далее для последующих энергетических уровней. А что насчет волновых функций? Вы нашли общее уравнение в предыдущем разделе, посмотрели значения полиномов Эрмита, а затем можно перевести все единицы измерения длины в фемтометры (1 фм = 1×10^{-15} м). Это дает вам $x_0 = 3,71$ фм для подстановки в уравнение. Вот уравнения для первых нескольких состояний, где x измеряется в фемтометрах:

$$\begin{aligned} \gg \psi_0(x) &= \frac{1}{1,92\sqrt[4]{\pi}} \exp\left(-x^2/27,5\right) \\ \gg \psi_1(x) &= \frac{1}{2,72\sqrt[4]{\pi}} 2\left(x/3,71\right) \exp\left(-x^2/27,5\right) \\ \gg \psi_2(x) &= \frac{1}{5,45\sqrt[4]{\pi}} \left[4\left(x/3,71\right)^2 - 2 \right] \exp\left(-x^2/27,5\right) \end{aligned}$$

ОБОЗНАЧЕНИЯ: ВОЛНОВАЯ И МАТРИЧНАЯ МЕХАНИКИ

Первые открытия предполагали квантовые скачки без четкого обоснования причин их возникновения. Нильс Бор попытался заложить прочный фундамент для этого нового типа физики, собрав в Копенгагене самых ярких молодых физиков для решения этих проблем.

Молодой Вернер Гейзенберг вместе со своим наставником Максом Борном (1882–1970) и другим учеником Борна Паскуалем Йорданом (1902–1980) понял, что результаты имеют смысл, если рассматривать их как ряд чисел в матричном формате.

Когда спустя несколько месяцев блестящий английский студент-физик Поль Дирак (1902–1984) прочитал опубликованную статью Гейзенберга, он понял, что матрицы, представленные Гейзенбергом, похожи на структуру, называемую скобками Пуассона. До конца 1925 года Дирак самостоятельно вывел матричную механику с помощью другого метода.

Затем физики применили эти матричные методы к сложной проблеме: попытке достичь тех же результатов, что и Бор в своем описании электронных орбит в атоме.

Эта проблема была слишком сложной даже для этих блестящих физиков, но, к счастью, Гейзенберг был другом Вольфганга Паули (1900–1958), который помог им.

Тем временем группа Бора продолжала работать над другим, основанным на вычислениях подходом. Эрвин Шредингер (1887–1961) опубликовал свою волновую функцию, краеугольный камень волновой механики, в 1926 году. Многие физики были рады, что им не придется изучать новую матричную математику, но у волновой функции были свои проблемы... пока Макс Борн (да, наставник Гейзенберга) не понял, что уравнение Шредингера связано с квантовыми вероятностями. Позже Дирак разработает подход с использованием нотации Дирака: опубликованный в 1939 году, он представляет собой более упрощенную математику, которую мы сейчас используем для квантовой механики.

В чем смысл этого отступления в историю квантовой механики? Матричный и волновой подходы одинаково верны, и некоторые блестящие физики проделали огромную работу (и получили целую кучу Нобелевских премий по физике), чтобы доказать, что между ними можно прыгать.

- » Определение углового момента и гамильтониана
- » Нахождение собственных функций углового момента
- » Понимание матричного представления углового момента
- » Переключение между прямоугольными и сферическими координатами

Глава 10

Работа с моментом импульса на квантовом уровне

В классической механике вы можете измерить угловой момент, привязав мячик для гольфа к веревке и вращая его над головой, создавая объект, движущийся по круговой траектории. В квантовой механике мы думаем в терминах одной молекулы, состоящей из двух связанных атомов, вращающихся друг относительно друга. Молекулярный уровень — это тот уровень, на котором квантовомеханические эффекты становятся заметными. И на этом уровне оказывается, что угловой момент квантован. А поскольку квантование имеет ощутимые результаты во многих случаях — например, в спектре возбужденных атомов — это важная тема. (См. главу 4 для введения в квантовомеханические спектры.)

Уравнения в этой главе дают основу для понимания углового момента в квантовомеханической системе, что имеет большее значение, чем можно было бы ожидать. Как оказалось, исследования, которые глубже изучали поведение физики частиц, сделали удивительные открытия о том, как угловой момент проявляется в этих системах. В квантовой механике угловой момент раскрывает фундаментальное новое свойство материи, называемое *спином* (тема главы 11).

Примечание: В этой главе предполагается, что у вас есть базовые знания классического углового момента. Буква L представляет угловой момент в уравнениях, используемых в этой главе, и она связана с полной энергией на квантовом уровне так же, как линейный импульс P

был связан с ней в предыдущих главах. Также в этой главе вы будете использовать математические основы дифференциального исчисления, линейной алгебры и дифференциальных уравнений.

Построение гамильтониана

Помимо кинетической и потенциальной энергии, частицы также могут обладать вращательной энергией. Вот как выглядит уравнение Гамильтона (для полной энергии, см. Главу 9):

$$H = \frac{L^2}{2I}$$

Здесь L^2 — квадрат оператора углового момента L , а I — момент инерции при вращении. Каковы собственные состояния углового момента? Можно записать следующее, где l является собственным значением оператора углового момента L :

$$H|l\rangle = \frac{L^2}{2I}|l\rangle$$

Но этого, оказывается, недостаточно, поскольку угловой момент является вектором в трехмерном пространстве — и может быть направлен в любую сторону. Угловой момент обычно задается величиной и компонентой в одном направлении, как правило, в направлении Z . Поэтому в дополнение к величине l необходимо также указать компоненту L в направлении Z , то есть L_z (выбор оси Z произволен — можно с тем же успехом использовать направление X или Y).

Если квантовое число Z -компоненты углового момента обозначается как m (обратите внимание, что это m не обозначает массу), то полное собственное состояние задается как $|l, m\rangle$, так что уравнение принимает следующий вид:

$$H|l, m\rangle = \frac{L^2}{2I}|l, m\rangle$$

Именно такое обсуждение собственных состояний я рассматриваю в этой главе, и начинаю с рассмотрения углового момента.

Операторы в действии: кругом с угловым моментом

Взгляните на рисунок 10-1, который изображает вращающийся диск в трехмерном пространстве. Поскольку мы работаем в трех измерениях, нельзя упростить процесс, игнорируя направление вектора.

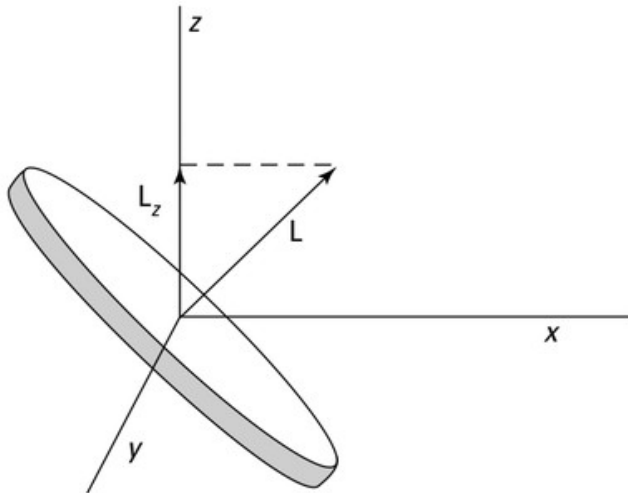


РИСУНОК 10-1:

Вращающийся диск с вектором углового момента $\mathbf{L}$.



ПОДСКАЗКА

Вектор углового момента диска, $\mathbf{L}$, направлен перпендикулярно плоскости вращения. Здесь можно применить правило правой руки: если держать правую руку так, чтобы четыре пальца изгибались в направлении вращения объекта, то вытянутый большой палец будет указывать в направлении вектора $\mathbf{L}$.

Наличие вектора $\mathbf{L}$, направленного из плоскости вращения, имеет определенные преимущества. Например, если что-то вращается с постоянной угловой скоростью, вектор $\mathbf{L}$ будет постоянным по величине и направлению — что более логично, чем если бы вектор $\mathbf{L}$ вращался в плоскости вращения диска и постоянно менял направление.

Поскольку $\mathbf{L}$ является трехмерным вектором, он может быть направлен в любую сторону, а значит, имеет компоненты по осям x , y и z — L_x , L_y и L_z (которые являются не векторами, а просто числовыми величинами). На рисунке 10-1 показана компонента L_z .

$\mathbf{L}$ представляет собой векторное произведение радиус-вектора $\mathbf{R}$ и линейного импульса $\mathbf{P}$, то есть $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$. Компоненты L_x , L_y и L_z в любой момент времени можно также записать через операторы следующим образом, где P_x , P_y и P_z — это *операторы импульса* (которые дают импульс по направлениям x , y и z), а X , Y и Z — это *операторы положения* (которые дают положение по направлениям x , y и z):

$$\begin{aligned} \gg L_x &= YP_y - ZP_z \\ \gg L_y &= ZP_x - XP_z \\ \gg L_z &= XP_y - YP_x \end{aligned}$$

Операторы импульса P_x , P_y и P_z можно записать как:

$$P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$P_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$$

$$P_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

Аналогично операторы координат можно представить через соответствующие координаты:

$$\left\{ \begin{array}{l} \gg X = x \\ \gg Y = y \\ \gg Z = z \end{array} \right.$$

Подставляя эти операторные представления в уравнения для L_x , L_y и L_z , получаем:

$$L_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$L_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Нахождение коммутаторов L_x , L_y , L_z

Давайте сначала рассмотрим L_x , L_y и L_z с точки зрения их *коммутиции* (то есть, можно ли их измерить одновременно; см. введение в эту концепцию в главе 7). Если они коммутируют (например, если $[L_x, L_y] = 0$), то можно точно измерить любые две из них (например, L_x и L_y). Если нет, то они подчиняются соотношению неопределенностей, и их нельзя измерить одновременно с абсолютной точностью.

Итак, каков коммутатор L_x и L_y ? Используя $L_x = YP_z - ZP_y$ и $L_y = ZP_x - XP_z$, можно записать следующее уравнение:

$$[L_x, L_y] = [YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z]$$

Это также можно записать как:

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= [Y P_z, Z P_x] - [Y P_z, X P_z] - [Z P_y, Z P_x] + [Z P_x, X P_z] = \\ &= Y [P_z, Z] P_x + X [Z, P_y] P_y = i\hbar (X P_y - Y P_x)\end{aligned}$$

Но $X P_y - Y P_x = L_z$, поэтому $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$. Таким образом, L_x и L_y не коммутируют, что означает невозможность их одновременного измерения с абсолютной точностью. Можно также показать, что $[L_y, L_z] = i\hbar L_x$ и $[L_z, L_x] = i\hbar L_y$.



Поскольку ни одна из компонент углового момента не коммутирует с другими, невозможно измерить любые две из них одновременно с абсолютной точностью. Досадно.

То, что компоненты углового момента не коммутируют, также означает, что операторы L_x , L_y и L_z не могут иметь общих собственных состояний. Так что же делать? Как найти оператор, который имеет общие собственные состояния с различными компонентами L , чтобы можно было записать собственные состояния как $|l, m\rangle$?

Обычный трюк здесь заключается в том, что квадрат углового момента L^2 является скаляром, а не вектором, поэтому он будет беспрепятственно коммутировать с операторами L_x , L_y и L_z :

$$\begin{aligned}& \gg [L^2, L_x] = 0 \\ & \gg [L^2, L_y] = 0 \\ & \gg [L^2, L_z] = 0\end{aligned}$$

Отлично, прогресс налицо. Поскольку L_x , L_y и L_z не коммутируют, нельзя создать собственное состояние, которое перечисляет квантовые числа для любых двух из них. Но поскольку L^2 коммутирует с ними, можно построить собственные состояния, имеющие собственные значения для L^2 и любой одной из компонент L_x , L_y и L_z . По общепринятому соглашению обычно выбирают направление L_z .

Создание собственных состояний углового момента

Теперь пришло время создать фактические собственные состояния $|l, m\rangle$ угловых моментов в квантовой механике. Эти собственные состояния дают собственные значения, которые позволяют решить гамильтониан для получения разрешенных энергетических уровней объекта с угловым моментом.



ПОДСКАЗКА

Не делайте предположение, что собственные состояния — это $|l, m\rangle$. Я перепису их как $|\alpha, \beta\rangle$, где собственное значение L^2 равно $L^2|\alpha, \beta\rangle = \hbar^2\alpha|\alpha, \beta\rangle$. Таким образом, собственное значение L^2 равно $\hbar^2\alpha$, где α еще предстоит найти. Аналогично, собственное значение L_z равно $L_z|\alpha, \beta\rangle = \hbar\beta|\alpha, \beta\rangle$.

Чтобы продвинуться дальше, можно воспользоваться знакомым процессом из главы 9, в котором вводятся операторы понижения и повышения, применяя оператор понижения к основному состоянию и решая для основного состояния.

Эти операторы действуют на квантовое число L_z , и вы можете определить операторы повышения и понижения следующим образом:

- » Оператор повышения: $L_+|\alpha, \beta\rangle = c|\alpha, \beta + 1\rangle$
- » Оператор понижения: $L_-|\alpha, \beta\rangle = d|\alpha, \beta - 1\rangle$

Таким образом, повышающий оператор L_+ повышает квантовое число β на 1. Аналогично, понижающий оператор L_- понижает квантовое число β на 1. Ни один из операторов не изменяет квантовое число α . Значения констант c и d вы сможете определить в разделе «Нахождение собственных значений операторов повышения и понижения» далее в этой главе.

Нахождение собственных значений углового момента

Собственные значения углового момента — это возможные значения, которые может принимать угловой момент, поэтому их важно найти. Для нахождения возможных квантовых состояний углового момента используются минимальные и максимальные значения β (обозначаемые как $\beta_{\max}$ и $\beta_{\min}$). Затем мы рассмотрим пример двухатомной молекулы — молекулы, состоящей из двух атомов, вращающихся друг относительно друга. В следующем разделе показано, как это сделать.

Вывод уравнений собственных состояний с $\beta_{\max}$ и $\beta_{\min}$

Здесь мы ищем уравнения собственных состояний для квантового углового момента. Для этого применяется метод нахождения нижней и верхней границ углового момента. К счастью, поскольку полный угловой момент не может быть отрицательным, такие границы существуют.

1. Запишем уравнение в бра-кет обозначениях с нижней границей.

Оператор углового момента является суммой трех компонентных операторов, поэтому оказывается, что $L^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2$, что является неотрицательным числом, следовательно, $L^2 - L_z^2 \geq 0$. Это имеет смысл, если подумать: полный угловой момент минус только z-компонента углового момента не может быть меньше 0.

Это означает, что вы можете записать следующее уравнение:

$$\langle \alpha, \beta | (L^2 - L_z^2) | \alpha, \beta \rangle \geq 0$$

2. Применим операторы.

Подставляя (дважды) $L^2 | \alpha, \beta \rangle = \alpha \hbar^2 | \alpha, \beta \rangle$ and $L_z | \alpha, \beta \rangle = \beta \hbar | \alpha, \beta \rangle$ и используя тот факт, что собственные состояния нормированы, получаем:

$$\langle \alpha, \beta | (L^2 - L_z^2) | \alpha, \beta \rangle = \hbar^2 (\alpha - \beta^2) \geq 0$$

Из последнего уравнения можно найти, что $\alpha \geq \beta^2$. Таким образом, существует максимально возможное значение β , которое можно обозначить как $\beta_{\max}$.

3. Применяем операторы повышения и понижения.

Здесь можно действовать хитрее, поскольку должно существовать состояние $| \alpha, \beta_{\max} \rangle$ такое, что β нельзя увеличить дальше. Следовательно, если применить оператор повышения, получим ноль:

$$L_+ | \alpha, \beta_{\max} \rangle = 0$$

Применяя оператор понижения к этому уравнению, также получаем ноль:

$$L_- L_+ | \alpha, \beta_{\max} \rangle = 0$$

4. Переходим к операторам углового момента.

Здесь нужно использовать еще одно соотношение, которое получается при применении оператора понижения к оператору повышения: $L_- L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$. (Вы можете проверить это самостоятельно в книге «Quantum Physics Workbook For Dummies» [Wiley].) Применяя это соотношение здесь, получаем:

$$(L^2 - L_z^2 - \hbar L_z) | \alpha, \beta_{\max} \rangle = 0$$

Подставляя $L^2 | \alpha, \beta_{\max} \rangle = \alpha \hbar^2 | \alpha, \beta_{\max} \rangle$ and $L_z | \alpha, \beta_{\max} \rangle = \beta_{\max} \hbar | \alpha, \beta_{\max} \rangle$, получаем:

$$\begin{aligned} (\alpha - \beta_{\max}^2 - \beta_{\max}) \hbar^2 &= 0 \\ \alpha &= \beta_{\max} (\beta_{\max} + 1) \end{aligned}$$

Теперь мы определили α через $\beta_{\max}$. В этот момент принято переименовать $\beta_{\max}$ в l , а β в m (который, напомним из начала главы, является квантовым числом для z -компоненты углового момента и не представляет массу), так что $|\alpha, \beta\rangle$ становится $|l, m\rangle$ и:

- $L^2|l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2|l, m\rangle$
- $L_z|l, m\rangle = m\hbar|l, m\rangle$

Можно сказать еще больше, применяя те же рассуждения, что и в предыдущих шагах.

Из неравенства $\alpha \geq \beta^2$ в шаге 2 следует, что помимо $\beta_{\max}$ должно существовать также $\beta_{\min}$, такое что при применении понижающего оператора L_- результат будет равен нулю, поскольку нельзя опуститься ниже $\beta_{\min}$. В этом случае шаги 3 и 4 приводят к следующему уравнению:

$$\begin{aligned} (\alpha - \beta_{\min}^2 + \beta_{\min})\hbar^2 &= 0 \\ \alpha - \beta_{\min}^2 + \beta_{\min} &= 0 \\ \alpha &= \beta_{\min}^2 - \beta_{\min} \\ \alpha &= \beta_{\min}(\beta_{\min} - 1) \end{aligned}$$

Сравнивая это уравнение с $\alpha = \beta_{\max}(\beta_{\max} + 1)$, получаем:

$$\beta_{\max} = -\beta_{\min}$$

Дальнейшее исследование квантовых чисел

После применения множества математических операций (см. предыдущий список шагов) можно вновь сосредоточиться на том, что означают полученные результаты. Вторая компонента собственного состояния (часть, которая максимизирует и минимизирует квантовое число β) представляет собой Z -компоненту — направление момента импульса. Таким образом, максимальное квантовое число направления момента импульса противоположно по знаку минимальному квантовому числу.

Исходя из того, как определен понижающий оператор L_- , можно взять $\beta_{\max}$ и, применив L_- некоторое дискретное число раз n , в итоге достичь $\beta_{\min}$.

$$\beta_{\max} = \beta_{\min} + n$$

Поскольку известно, что они симметричны (так как $\beta_{\max} = -\beta_{\min}$), это означает:

$$\beta_{\max} = \frac{n}{2}$$

Следовательно, $\beta_{\max}$ может быть либо целым числом (если n четное), либо полуцелым числом (если n нечетное).



ЗАПОМНИ

Поскольку $l = \beta_{\max}$, $m = \beta$, а n — положительное число, можно установить, что $-l \leq m \leq l$. Теперь у нас есть много информации об этой ситуации с квантовым угловым моментом:

- » Собственные состояния обозначаются как $|l, m\rangle$.
- » Квантовое число полного углового момента — это l .
- » Квантовое число проекции углового момента на ось z — это m .
- » $L^2|l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle$, где $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$
- » $L_z|l, m\rangle = \hbar m|l, m\rangle$, где $m = -l, -(l-1), \dots, l-1, l$.
- » $-l \leq m \leq l$.

Для каждого значения l существует $2l + 1$ значений m . Например, если $l = 2$, то m может принимать значения $-2, -1, 0, 1$ или 2 . Если $\frac{3}{2}, \dots$ то m может равняться $-\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$, и $\frac{5}{2}$.

Интуитивное понимание результатов



ЗАПОМНИ

Помимо строгих математических выкладок, давайте рассмотрим следующее: если угловой момент в целом больше, то логично ожидать, что и его проекция на ось Z также будет больше. Интуитивно это кажется вполне естественным результатом. Квантовая физика так

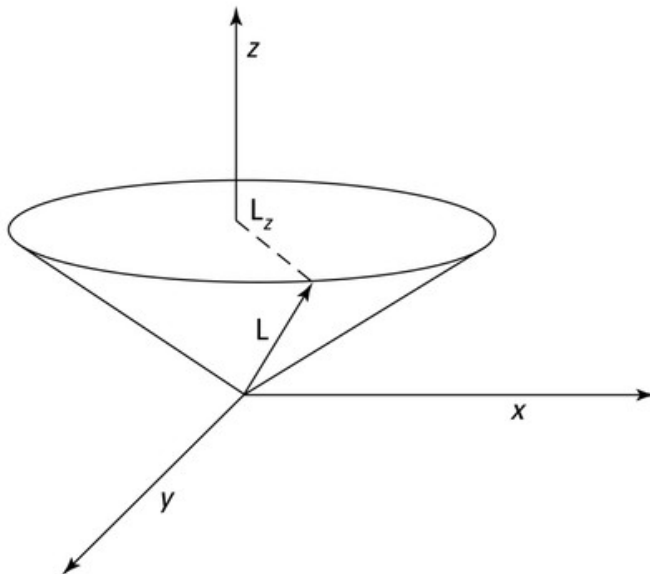


РИСУНОК 10-2:
 L и L_z .

сильно опирается на сложный математический формализм, что приятно, когда время от времени результаты оказываются интуитивно понятными!

На рисунке 10-2 показаны векторы L и L_z . L представляет полный угловой момент, а L_z — его проекцию на ось z .

Определение вращательной энергии двухатомной молекулы

В этом разделе рассматривается пример нахождения спектра вращательной энергии двухатомной молекулы. На рисунке 10-3 показана схема: вращающаяся двухатомная молекула состоит из двух атомов с массами m_1 и m_2 (не путать с квантовым числом m из предыдущего раздела, хотя это, к сожалению, и создает путаницу). Первый атом вращается на расстоянии $r = r_1$, а второй атом — на расстоянии $r = r_2$. Какова вращательная энергия молекулы?

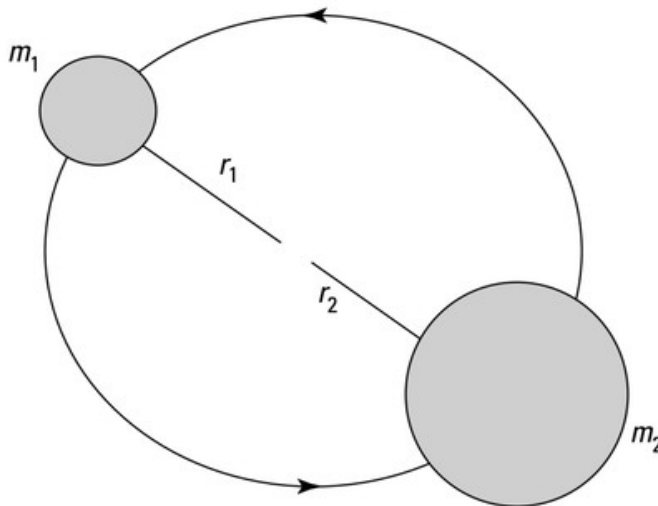


РИСУНОК 10-3.
Вращающаяся двухатомная молекула.

1. Определим гамильтониан и связанные переменные.

Начнем с того, что убедимся в наличии всех необходимых переменных. Гамильтониан для углового момента (как описано в разделе «Построение гамильтониана» ранее в этой главе) имеет вид:

$$H = \frac{L^2}{2I}$$

где I — момент инерции вращения, который выражается как:

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \mu r^2$$

где $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ и $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$.

Следовательно, гамильтониан принимает вид:

$$H = \frac{L^2}{2I} = \frac{L^2}{2\mu r^2}$$

2. Применим гамильтониан к векторам собственных состояний для нахождения E.

Применяя гамильтониан к собственным состояниям $|l, m\rangle$, получаем:

$$H|l, m\rangle = \frac{L^2}{2\mu r^2}|l, m\rangle$$

Из раздела «Дальнейшее исследование квантовых чисел» известно, что $L^2|l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2|l, m\rangle$, поэтому это уравнение принимает вид:

$$H|l, m\rangle = \frac{L^2}{2\mu r^2}|l, m\rangle = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}|l, m\rangle$$

И поскольку $H|l, m\rangle = E|l, m\rangle$, можно видеть, что:

$$E = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

Это и есть энергия как функция l — квантового числа углового момента для двухатомной молекулы. Важно помнить, что массы двух атомов играют роль, поскольку они определяют значение μ .

Нахождение собственных значений повышающего и понижающего операторов

В этом разделе рассматривается нахождение собственных значений повышающего и понижающего операторов углового момента, которые были введены в разделе «Создание собственных состояний углового момента» ранее в этой главе. Как и следовало ожидать, эти операторы повышают и понижают z -компоненту углового момента состояния.

Начнем с рассмотрения L_+ и попробуем найти c :

$$L_+|l, m\rangle = c|l, m+1\rangle$$

Умножение этого нового состояния на его эрмитово-сопряженное значение должно дать c^2 :

$$(L_+|\ell, m\rangle)^\dagger L_+|\ell, m\rangle = (c\langle\ell, m+1|)(c|\ell, m+1\rangle)$$

$$(L_+|\ell, m\rangle)^\dagger L_+|\ell, m\rangle = c^2\langle\ell, m+1|\ell, m+1\rangle$$

$$(L_+|\ell, m\rangle)^\dagger L_+|\ell, m\rangle = c^2$$

Транспонированное значение также можно записать через операторы повышения и понижения:

$$(L_+|\ell, m\rangle)^\dagger L_+|\ell, m\rangle = \langle\ell, m|L_+L_-|\ell, m\rangle = c^2$$

Что делать с L_-L_+ ? В помощь приведу еще одно полезное соотношение (которое вы можете доказать самостоятельно в «Рабочей тетради по квантовой физике для чайников»): $L_-L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$. Подставляя это соотношение, получаем:

$$\begin{aligned}\langle\ell, m|(L^2 - L_z^2 + \hbar L_z)|\ell, m\rangle &= c^2 \\ c &= \left(\langle\ell, m|(L^2 - L_z^2 + \hbar L_z)|\ell, m\rangle\right)^{1/2} \\ c &= \hbar[\ell(\ell+1) - m(m+1)]^{1/2}\end{aligned}$$

И это собственное значение L_+ . Аналогичный процесс для L_- дает собственное значение d . В результате получаем два соотношения:

$$\begin{aligned}L_+|\ell, m\rangle &= \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)}|\ell, m+1\rangle \\ L_-|\ell, m\rangle &= \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}|\ell, m-1\rangle\end{aligned}$$

Интерпретация углового момента через матрицы

В этом разделе мы рассмотрим матричное представление углового момента на квантовом уровне. Не волнуйтесь, мы будем работать с малыми квантовыми числами, поэтому матрицы не будут слишком большими. Матричный метод был первой системой квантовой механики. Физики сразу признали его крайне неудобным и в итоге заменили матричный метод на волновую механику и обозначения Дирака по простой причине: вычисления стали проще!

Рассмотрим систему с квантовым числом полного углового момента $l = 1$, что означает, что m может принимать значения $-1, 0$ и 1 . Таким

образом, три возможных состояния углового момента можно представить так:

$$|1, -1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad |1, 0\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |1, 1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Итак, как выглядят операторы, которые мы рассмотрели в этой главе, в матричном представлении? Например, что такое L^2 ? В матричной форме L^2 можно записать так:

$$L^2 = \begin{bmatrix} \langle 1, 1 | L^2 | 1, 1 \rangle & \langle 1, 1 | L^2 | 1, 0 \rangle & \langle 1, 1 | L^2 | 1, -1 \rangle \\ \langle 1, 0 | L^2 | 1, 1 \rangle & \langle 1, 0 | L^2 | 1, 0 \rangle & \langle 1, 0 | L^2 | 1, -1 \rangle \\ \langle 1, -1 | L^2 | 1, 1 \rangle & \langle 1, -1 | L^2 | 1, 0 \rangle & \langle 1, -1 | L^2 | 1, -1 \rangle \end{bmatrix}$$

Эта матрица может выглядеть немного пугающе, но сделайте глубокий вдох и решайте задачу по частям. Просто следуйте этим шагам:

1. Определите элементы, равные нулю.

Все векторы, кроме диагональных, комбинируются с ортогональным вектором, что означает, что они равны нулю. Так что с ними все просто. Только элементы по диагонали имеют ненулевые значения, о которых стоит беспокоиться.

2. Объединим векторы по диагонали. (Пока игнорируем оператор L^2 .)

Векторы объединяются со своими транспонированными значениями, и они нормированы, поэтому результат:

$$\langle 1, 1 | 1, 1 \rangle = 1 \quad \langle 1, 0 | 1, 0 \rangle = 1 \quad \langle 1, -1 | 1, -1 \rangle = 1$$

3. Применим оператор L^2 .

Оператор импульса L^2 дает $L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$ (что вы вычислили в разделе «Вывод уравнений собственных состояний с $\beta_{\max}$ и $\beta_{\min}$ » ранее в этой главе).

Поскольку $l = 1$, мы знаем, что $\hbar^2 l(l+1) = 2\hbar^2$. Поэтому матрицу для L^2 можно записать как:

$$L^2 = \begin{bmatrix} 2\hbar^2 & 0 & 0 \\ 0 & 2\hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2\hbar^2 \end{bmatrix} = 2\hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Таким образом, в матричной форме уравнение $L^2|1,1\rangle = 2\hbar^2|1,1\rangle$ становится:

$$2\hbar^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = 2\hbar^2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Аналогичные рассуждения можно применить и к другим операторам, рассмотренным ранее в этой главе.

Операторы повышения и понижения

Как насчет оператора L_+ ? Как вы, вероятно, знаете (из раздела «Нахождение собственных значений операторов повышения и понижения» ранее в этой главе), $L_+|\ell, m\rangle = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)}|\ell, m+1\rangle$. В этом примере $\ell=1$ и $m=+1, 0$, и -1 . Таким образом, имеем:

$$L_+|1, 1\rangle = 0 \quad L_+|1, 0\rangle = \sqrt{2}\hbar|1, 1\rangle \quad L_+|1, -1\rangle = \sqrt{2}\hbar|1, 0\rangle$$

В матричной форме оператор L_+ будет превращать первый вектор в 0, но будет увеличивать значение m в каждом из других столбцов на 1 и умножать на скаляр. Это выглядит следующим образом:

$$L_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

А что насчет L_- ? Применяя те же рассуждения для этого оператора, получаем следующую матричную форму:

$$L_- = \sqrt{2}\hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Вы можете проверить обе эти операторные матрицы с различными векторами, чтобы подтвердить, что они дают те же результаты, что и применение операторов в обозначениях Дирака.

Переходим к другим операторам L

После установления матриц для L^2 , L_+ и L_- , можно перейти к рассмотрению матричного представления для L_z . Это просто, потому что:

$$\left\{ \begin{array}{l} \gg \hbar |1, 1\rangle = L_z |1, 1\rangle \\ \gg 0 = L_z |1, 0\rangle \\ \gg -\hbar |1, 1\rangle = L_z |1, -1\rangle \end{array} \right.$$

Таким образом, первый столбец L_z дает скаляр $\hbar$, средний столбец дает 0, а последний столбец дает $-\hbar$. Результирующая матрица:

$$L_z = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

И, конечно, вы должны проверить эту матрицу, чтобы подтвердить, что она работает с различными векторами.

Аналогичная логика работает для нахождения операторов L_x , L_y и $[L_x, L_y]$. Это не так сложно, как может показаться, если использовать следующие отправные точки и применить матричное сложение:

$$\begin{aligned} L_x &= \frac{1}{2}(L_+ + L_-) \\ L_y &= \frac{i}{2}(L_- - L_+) \\ [L_x, L_y] &= L_x L_y - L_y L_x \end{aligned}$$

Завершающий штрих: Переход к сферическим координатам

Первые несколько разделов этой главы посвящены угловому моменту в обозначениях Дирака (специальный язык, разработанный для точного выражения квантовых состояний; его введение дано в главе 7). Прелесть этих обозначений с их «бра» и «кет» в том, что они не ограничивают вас какой-то конкретной системой представления. Вы можете работать непосредственно с бра и кет векторами или, если предпочитаете, переводить их в матричную форму.

Итак, у вас есть общие собственные состояния, с которыми можно работать достаточно легко (относительно говоря) в обозначениях Дирака, но что, если вы хотите углубиться в детали? Что, если вместо просто общих собственных состояний вы хотите найти конкретные собственные функции L_z и L^2 , те самые функции, которые можно использовать с операторами углового момента, такими как L^2 и L_z ? Что ж, если вы планируете погрузиться в эти детали, вам нужно немало изменить перспективу.

Закладываем (сферический) фундамент



ПОДСКАЗКА

Даже в классической физике при обсуждении углового момента имеет смысл перейти от традиционной декартовой системы прямоугольных координат к сферическим координатам (или полярным координатам в двумерном случае). Глава 13 полностью посвящена сферическим координатам, но я коснусь их здесь ради простоты. Математика углового момента быстро становится кошмаром в прямоугольной системе, но значительно упрощается в некоторых других координатных системах. На рисунке 10-4 показана сферическая система координат.

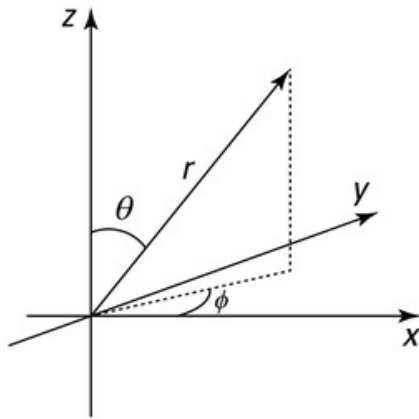


РИСУНОК 10-4.

Сферическая система координат.

В прямоугольной (декартовой) системе координат для ориентации используются координаты x , y и z . В сферической системе координат также используются три величины: r , θ и ϕ , как показано на рисунке 10-4. Можно выполнять преобразования между сферической и прямоугольными системами координат. Вектор r — это вектор до частицы, обладающей угловым моментом, θ — угол между r и осью z , а ϕ — угол между проекцией r на плоскость xy и осью x . Следующие уравнения показывают, как выразить три прямоугольные координаты через сферические.

$$\gg x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$\gg y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$\gg z = r \cos \theta$$

Рассмотрим уравнения для углового момента:

$$L_x = YP_z - ZP_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$L_y = ZP_x - XP_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$L_z = X P_y - Y P_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Когда вы объединяете уравнения углового момента с уравнениями преобразования в сферические координаты, можно получить следующие выражения:

$$\left\{ \begin{array}{l} \gg L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \gg L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \\ \gg L_+ = L_x - iL_y = \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{i \cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \gg L_- = L_x + iL_y = \hbar e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{i \cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \end{array} \right.$$

Эти уравнения выглядят довольно сложно. Обратите внимание на одну крайне важную особенность: переменная r полностью отсутствует. Они зависят только от θ и ϕ , что означает, что их собственные состояния зависят только от θ и ϕ , но не от r . Поэтому собственные функции операторов из предыдущего списка можно обозначить так:

$$\langle \theta, \phi | l, m \rangle$$

Традиционно собственные функции углового момента в сферических координатах обозначают как $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$, так что имеем:

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \langle \theta, \phi | l, m \rangle$$



ЗАПОМНИ

Помните, что ограничения на квантовые числа l и m проявятся в индексах $Y_{\ell m}$. Квантование в квантовой физике означает, что эти числа всегда принимают дискретные целочисленные значения, поскольку так работают квантовые числа.

Другими словами, если взять пример (из раздела «Повышающие и понижающие операторы» ранее в этой главе), где $l = 1$ и $m = +1, 0$ и -1 (здесь мы более явно указываем положительное значение m), то получим следующие функции $Y_{\ell m}$ для рассмотрения: Y_{1+1} , Y_{10} и Y_{1-1} . Забегая вперед, можно увидеть, что некоторые симметрии в этих уравнениях позволяют объединить первую и последнюю функции в единое обозначение: $Y_{1\pm 1}$. Такое упрощение — еще одна веская причина использовать сферические координаты!

Итак, теперь, когда у вас есть представление о том, что искать, можно приступить к поиску конкретного вида $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$. При действии операторов L^2 и L_z на собственные состояния углового момента, как было показано ранее, выполняются следующие соотношения:

$$L^2|\ell, m\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2|\ell, m\rangle$$

$$L_z|\ell, m\rangle = m\hbar|\ell, m\rangle$$

Следовательно, должно выполняться:

$$\begin{aligned} \gg L^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) \\ \gg L_z Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= m\hbar Y_{\ell m}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

Более того, можно пойти дальше. Помните, что L_z — это Z -компонента углового момента, что означает, что L_z зависит только от θ (угла относительно оси z) и совсем не зависит от ϕ (угла относительно оси x). Это наводит на мысль, что $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ можно разделить на часть, зависящую от θ , и часть, зависящую от ϕ . Разделение $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ на части выглядит следующим образом:

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi)$$



ПОДСКАЗКА

Такое разделение собственных функций делает работу со сферическими координатами особенно полезной. В прямоугольных координатах подобное разделение невозможно. Даже прежде чем перейти к более детальной работе, важно четко понимать, что это разделение собственной функции можно эффективно использовать для получения решений.

Собственные функции L_z в сферических координатах

Начнем с нахождения собственных функций L_z в сферических координатах. Напомним (см. предыдущий раздел), что оператор L_z выглядит так:

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Выглядит не так уж плохо, правда? Начнем с применения оператора к $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$, а затем разобьем его, чтобы использовать различные части функции. (**Примечание:** Здесь вы увидите главное преимущество разделения сферических функций.) Поскольку оператор L_z является производной по ϕ , часть функции, зависящая только от θ , выносится за знак производной.

$$\begin{aligned} L_z Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= L_z \Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi) \\ L_z Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi) \end{aligned}$$

$$L_z Y_{lm}(\theta, \phi) = -i\hbar \Theta_{lm}(\theta) \frac{\partial \Phi_m}{\partial \phi}(\phi)$$

Но это не все, что мы знаем об L_z . Из предыдущего раздела мы видели, что $L_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi)$ и $Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$

$$\begin{aligned} -i\hbar \Theta_{lm}(\theta) \frac{\partial \Phi}{\partial \phi}(\phi) &= m\hbar \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi) \\ -i \frac{\partial \Phi}{\partial \phi}(\phi) &= m \Phi_m(\phi) \end{aligned}$$

Это выглядит вполне разрешимым (ладно, может быть, и не выглядит простым, но решение можно найти), и решением является просто:

$$\Phi_m(\phi) = C e^{im\phi}$$

где C — константа интегрирования. C можно определить, потребовав, чтобы $\Phi_m(\phi)$ была нормирована — то есть, чтобы выполнялось следующее условие:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\phi) \Phi_m(\phi) d\phi = 1$$

что дает $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$.

Итак, $\Phi_m(\phi)$ равняется:

$$\Phi_m(\phi) = \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$$

Вы делаете успехи — вы определили форму $\Phi_m(\phi)$, поэтому $Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$, что равно

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi) = \Theta_{lm}(\theta) \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$$

Это отлично — вы на полпути, но вам еще нужно определить форму $\Theta_{lm}(\theta)$, собственной функции L^2 . Это произойдет в следующем разделе.

Собственные функции L^2 в сферических координатах

Вы можете опираться на работу, рассмотренную в предыдущем разделе, и взяться за собственную функцию L^2 , $\Theta_{lm}(\theta)$. Вы уже знаете (см. раздел «Закладывая [сферические] основы»), что в сферических координатах оператор L^2 выглядит так:

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

Это довольно сложный оператор. Вы также знаете, что

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \Theta_{\ell m}(\theta) \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$$

Затем вы проходите следующие шаги для нахождения собственных функций:

1. Применяете оператор L^2 .

Таким образом, применение оператора L^2 к $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ дает вам следующее:

$$L^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \left(\Theta_{\ell m}(\theta) \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \right)$$

2. Переписываете $Y_{\ell m}$ и упрощаете.

И поскольку $L^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1)\hbar^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1)\hbar^2 \Theta_{\ell m}(\theta) \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$, это уравнение принимает вид:

$$\begin{aligned} & -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \left(\Theta_{\ell m}(\theta) \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \right) = \\ & = \ell(\ell + 1)\hbar^2 \Theta_{\ell m}(\theta) \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \end{aligned}$$

Во что же вы вляпались? После сокращения членов и вычитания правой части из левой вы наконец получаете следующее дифференциальное уравнение (которое затем можно упростить):

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \left(\Theta_{\ell m}(\theta) e^{im\phi} \right) + \ell(\ell + 1) \Theta_{\ell m}(\theta) e^{im\phi} = 0 \\ & \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + \ell(\ell + 1) \right] \Theta_{\ell m}(\theta) = 0 \end{aligned}$$

3. Решите дифференциальное уравнение.

Я прощаю вас за надежду избежать всей тяжелой работы по решению этого уравнения. И вам повезло! Это уравнение является *дифференциальным уравнением Лежандра*, и его решения хорошо известны. В общем случае решения имеют следующий вид:

$$\Theta_{\ell m}(\theta) = C_{\ell m} P_{\ell m}(\cos \theta)$$

где $P_{\ell m}(\cos \theta)$ – это присоединенная функция Лежандра.

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ, ФУНКЦИИ И ПОЛИНОМЫ ЛЕЖАНДРА

Дифференциальные уравнения Лежандра – это хорошо известная форма дифференциальных уравнений, и математики решили этот свод уравнений за вас. Ура математикам!

Вы можете начать с выделения зависимости m , которая работает таким образом с функциями Лежандра:

$$P_{\ell m}(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_{\ell}(x)$$

где $P_{\ell}(x)$ называется *полиномом Лежандра* и задается формулой Родрига:

$$P_{\ell}(x) = \frac{(-1)^{\ell}}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell}}{dx^{\ell}} (1-x^2)^{\ell}$$

Используя это уравнение, можно вывести первые несколько полиномов Лежандра:

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 & P_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^2 - 3x) \\ P_1(x) &= x & P_4(x) &= \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3) \\ P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1) & P_5(x) &= \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x) \end{aligned}$$

и так далее. Вот как выглядят первые несколько полиномов $P_{\ell}(x)$. А как выглядят присоединенные функции Лежандра $P_{\ell m}(x)$? Их тоже можно вычислить. Можно начать с $P_{\ell 0}(x)$, где $m = 0$. Они простые, потому что $P_{\ell 0}(x) = P_{\ell}(x)$, поэтому:

- $P_{10}(x) = x$
- $P_{20}(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$
- $P_{30}(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$

Для $P_{\ell m}(x)$, где $m \neq 0$, нужно вернуться к полной функции Лежандра (а не просто к полиному) и найти их, но, к счастью, бóльшая часть работы уже сделана после того, как вы нашли соответствующие $P_{\ell}(x)$. Вот несколько примеров наиболее полезных полиномов Лежандра, которые могут вам понадобиться:

- $P_{11}(x) = \sqrt{1-x^2}$
- $P_{21}(x) = 3x\sqrt{1-x^2}$
- $P_{22}(x) = 3(1-x^2)$
- $P_{31}(x) = \frac{3}{2}(5x^2 - 2)\sqrt{1-x^2}$

- $P_{32}(x) = 15x(1-x^2)$
- $P_{33}(x) = 15x\sqrt{(1-x^2)^3}$

Эти уравнения дают вам общее представление о том, как выглядят функции $P_{\ell m}$. Более подробный анализ можно найти в ресурсах по дифференциальным уравнениям, таких как:

«Дифференциальные уравнения для чайников» (Wiley)

<https://mathworld.wolfram.com/LegendrePolynomial.html>

Видео «Введение в полиномы Лежандра»: <https://youtu.be/djUmwbPw20?si=uuPbC8DklQFq1Vbo>

4. Нормируйте для нахождения констант.

Теперь вы знаете, как выглядят функции $P_{\ell m}$ (по крайней мере, если вы прочитали сноску), но как выглядят константы $C_{\ell m}$? Как только вы получите их, у вас будут полные собственные функции углового момента $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$, поскольку $Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi)$.

Константы $C_{\ell m}$ можно вычислить так же, как вычисляются все подобные константы интегрирования в квантовой физике – нормируя собственные функции на 1. Для $Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi)$ это выглядит следующим образом:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \sin\theta d\theta d\phi = 1$$

Подставьте в это уравнение следующие три величины:

- $Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi)$
- $\Phi_m(\phi) = \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$
- $\Theta_{\ell m}(\theta) = C_{\ell m} P_{\ell m}(\cos\theta)$

Получится следующее:

$$\frac{|C_{\ell m}|^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi |P_{\ell m}(\cos\theta)|^2 \sin\theta d\theta = 1$$

Интеграл по ϕ дает 2π , так что выражение принимает вид:

$$|C_{\ell m}|^2 \int_0^\pi |P_{\ell m}(\cos\theta)|^2 \sin\theta d\theta = 1$$

Вычислив интеграл и решив уравнение относительно $C_{\ell m}$, получаем:

$$|C_{\ell m}|^2 \frac{2}{2\ell+1} \frac{(\ell+|m|)!}{(\ell-|m|)!} = 1$$

$$C_{\ell m} = (-1)^{|m|} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{2(\ell+|m|)!}}$$

Это означает, что:

$$\Theta_{\ell m}(\theta) = (-1)^{|m|} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{2(\ell+|m|)!}} P_{\ell m}(\cos \theta)$$

Таким образом, $Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi)$, являющаяся собственной функцией углового момента в сферических координатах, имеет вид:

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = (-1)^{|m|} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{4\pi(\ell+|m|)!}} P_{\ell m}(\cos \theta) e^{im\phi}$$

Функции, задаваемые этим уравнением, называются *нормированными сферическими гармониками*.

Вот как выглядят первые несколько нормированных сферических гармоник:

$$\begin{aligned} \gg Y_{00}(\theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ \gg Y_{10}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ \gg Y_{1\pm 1}(\theta, \phi) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\phi} \sin \theta \\ \gg Y_{20}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2 \theta - 1) \\ \gg Y_{2\pm 1}(\theta, \phi) &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{\pm i\phi} \sin \theta \cos \theta \\ \gg Y_{2\pm 2}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{\pm 2i\phi} \sin^2 \theta \end{aligned}$$

Назад к прямоугольным координатам

В предыдущем разделе мы вычислили собственные функции в сферических координатах, что дает преимущества с точки зрения упрощения. Но что, если вам все-таки нужны эти собственные функции в прямоугольных координатах?

К счастью, существуют уравнения для перехода между сферическими и прямоугольными координатами. Если вы их не помните и не хотите возвращаться к началу раздела о сферических координатах, вот они в несколько иной форме:

$$\left\{ \begin{array}{l} \gg \sin\theta \cos\phi = \frac{x}{r} \\ \gg \sin\theta \sin\phi = \frac{y}{r} \\ \gg \cos\theta = \frac{z}{r} \end{array} \right.$$

Подстановка этих уравнений в сферические решения для $Y_{\ell m}$ (иногда с ловкими преобразованиями тригонометрических тождеств, которые я с удовольствием оставляю читателю в качестве дополнительного упражнения) дает сферические гармоники в прямоугольных координатах:

$$\left\{ \begin{array}{l} \gg Y_{00}(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ \gg Y_{10}(x, y, z) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left(\frac{z}{r} \right) \\ \gg Y_{1\pm 1}(x, y, z) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left(\frac{x \pm iy}{r} \right) \\ \gg Y_{20}(x, y, z) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left(\frac{3z^2 - r^2}{r^2} \right) \\ \gg Y_{2\pm 1}(x, y, z) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \left(\frac{z(x \pm iy)}{r^2} \right) \\ \gg Y_{2\pm 2}(x, y, z) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \left(\frac{(x^2 - y^2 \pm 2ixy)}{r^2} \right) \end{array} \right.$$

Угловой момент может быть математически сложным — особенно в квантовой механике, — но он играет ключевую роль. Изучение углового момента привело к важному открытию в квантовой механике — существованию свойства физических частиц (спина), которое никогда ранее не предполагалось. Подробнее о спине читайте в следующей главе.

- » Открытие спина с помощью эксперимента Штерна-Герлаха
- » Рассмотрение собственных состояний и спиновых обозначений
- » Понимание фермионов и бозонов
- » Сравнение операторов спина с операторами углового момента
- » Работа с матрицами Паули

Глава 11

Головокружительное знакомство со спином

Физики говорят, что орбитальный момент импульса — не единственный вид углового момента, присутствующий в атоме. Электроны также могут иметь внутренний, присущий им угловой момент. Этот тип встроеного углового момента называется спином. Вращаются ли электроны на самом деле — мы никогда не узнаем, поскольку они являются практически точечными частицами без какой-либо видимой внутренней структуры. Тем не менее факт остается фактом — у них есть собственный угловой момент, и они ведут себя так, *как будто* вращаются. Сбивает с толку? Добро пожаловать в квантовую физику!

Именно об этом и пойдет речь в данной главе — о внутреннем, присущем субатомным частицам квантовомеханическом спине. Вы узнаете об эксперименте, который впервые заставил физиков утверждать, что электроны обладают этим свойством. Затем мы рассмотрим, как спин связан с квантовыми числами, собственными состояниями, операторами и обозначениями, с которыми вы познакомились в предыдущих главах (с 7 по 10). И, наконец, вы узнаете, как спин помогает классифицировать частицы в физике и какие свойства связаны с этими классификациями.

Примечание: В этой главе используются знания об угловом моменте, поэтому было бы неплохо обратиться к главе 10. Также может быть полезно освежить знания об электромагнетизме из главы 2. Кроме того, для понимания уравнений в этой главе (которых здесь меньше,

чем в других главах) все еще потребуются классические инструменты квантовой физики: математический анализ, линейная алгебра и дифференциальные уравнения.

Исследование эксперимента Штерна-Герлаха и загадка исчезнувшего пятна

Эксперимент Штерна-Герлаха неожиданно выявил существование спина в 1922 году. Физики Отто Штерн и Вальтер Герлах пропустили пучок атомов серебра между полюсами магнита, магнитное поле которого было направлено вертикально (как показано на рисунке 11-1). Поведение атомов (см. рисунок) показало, что разные атомы следовали по разным траекториям (спин вверх или вниз) в магнитном поле.

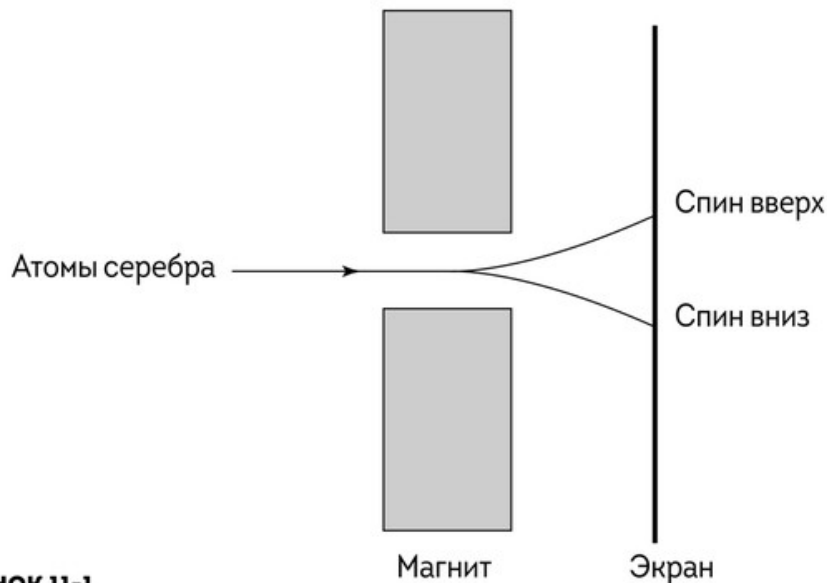


РИСУНОК 11-1.
Эксперимент Штерна-Герлаха.

Поскольку 46 из 47 электронов серебра расположены в симметричном облаке вокруг ядра атома, вклады в угловой момент от отдельных электронов взаимно компенсируются. В результате они никак не влияют на полный орбитальный угловой момент атома. Весь результирующий угловой момент определяется только 47-м электроном, поскольку у него нет парного электрона, который мог бы скомпенсировать его угловой момент.

47-й электрон может находиться в:

- » Состоянии $5s$, в котором его угловой момент $\ell = 0$, а z -компонента этого углового момента равна 0.
- » Состоянии $5p$, в котором его угловой момент $\ell = 1$, что означает, что z -компонента его углового момента может принимать значения -1 , 0 или 1.

Исходя из этих возможных состояний, Штерн и Герлах ожидали увидеть либо одно, либо три пятна на экране, показанном справа на рисунке 11-1, соответствующих различным состояниям z -компоненты углового момента.

Однако, как известно, они наблюдали только два пятна (обозначенных на рисунке как «Спин вверх» и «Спин вниз»). Это несоответствие между ожиданиями и результатами озадачивало физическое сообщество около трех лет. Затем, в 1925 году, физики Сэмюэл А. Гаудсмит и Джордж Ю. Уленбек предположили, что электроны обладают собственным угловым моментом — и именно этот собственный угловой момент создавал магнитный момент, взаимодействующий с магнитным полем. В конце концов, было очевидно, что в эксперименте проявлялся какой-то угловой момент, отличный от орбитального.



ЗАПОМНИ

Этот «другой» встроенный угловой момент получил название спин. Пучок атомов серебра разделяется на две части в зависимости от направления спина 47-го электрона в атоме, так что существует два возможных спиновых состояния, которые стали известны как «*вверх*» и «*вниз*».

Спин — это чисто квантово-механический эффект, не имеющий реальных аналогов в классической физике. Ближайшее, с чем его можно сравнить, — это вращение Земли вокруг своей оси при движении вокруг Солнца: у Земли есть как спин (из-за вращения вокруг оси), так и орбитальный угловой момент (из-за обращения вокруг Солнца). Но даже эта аналогия не может полностью объяснить спин в классических терминах, поскольку теоретически Земля могла бы существовать и без вращения. Однако электроны невозможно лишить спина, и то же самое относится к другим субатомным частицам, обладающим спином, таким как протоны.



ПОДСКАЗКА

Спин не зависит от пространственных степеней свободы; даже если бы электрон находился в состоянии покоя (что противоречит принципу неопределенности; см. Главу 3), он все равно обладал бы спином.

Погружаемся глубже в тему спина и собственных состояний

Спин преподносит нам неожиданный поворот. Когда мы имеем дело с орбитальным угловым моментом (см. главу 10), мы можем построить операторы углового момента, поскольку орбитальный угловой момент является произведением импульса и радиуса. Но спин является внутренним свойством; здесь не участвует оператор импульса.

Вот в чем суть: спин нельзя описать с помощью дифференциального оператора и нельзя найти собственные функции для спина так, как это делается для углового момента. Остается только использовать обозначения Дирака — бра и кет — для описания этих квантовых состояний, которые не привязаны к какому-либо конкретному пространственному представлению.

В главе 10 вы также рассматривали вещи с точки зрения углового момента, где были введены собственные состояния орбитального углового момента в виде: $|\ell, m\rangle$ (где ℓ — квантовое число углового момента, а m — квантовое число z -компоненты углового момента).

Такую же нотацию можно использовать для собственных состояний спина. Как и в случае с орбитальным угловым моментом, можно использовать квантовое число полного спина и квантовое число, указывающее на спин вдоль оси z . (**Примечание:** Ось z всегда направлена вдоль приложенного магнитного поля. У спина нет фиксированной оси.)



ЗАПОМНИ

Для обозначения квантового числа полного спина и z -компоненты спина используются буквы s и m (иногда их записывают как s и m_s). Другими словами, собственные состояния спина записываются как $|s, m\rangle$.

Знакомимся с половинами и целыми: поздоровайтесь с фермионами и бозонами

По аналогии с орбитальным угловым моментом, можно предположить, что m (z -компонента спина) может принимать значения $-s, -s + 1, \dots, s - 1$ и s , где s — квантовое число полного спина. Для электронов атома серебра (см. раздел «Исследование эксперимента Штерна-Герлаха и случай пропавшего пятна» ранее в этой главе) Штерн и Герлах наблюдали два пятна, поэтому $2s + 1 = 2$, что означает $s = 1/2$. Следовательно, m может быть равно $+1/2$, что соответствует электрону с «направленным вверх спином», или $-1/2$ для «направленного вниз спина». Итак, вот возможные собственные состояния для электронов с точки зрения спина:

- » Собственное состояние спина вверх: $\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$
- » Собственное состояние спина вниз: $\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$

Так что же, у всех субатомных частиц $s = 1/2$? Нет. У них есть следующие варианты.

- » **Фермионы:** В физике частицы с полуцелым спином называются *фермионами*. К ним относятся электроны, протоны, нейтроны и даже кварки. Например, электроны, протоны и нейтроны имеют спин $s = 1/2$, а некоторые частицы (называемые дельта-частицами) имеют $s = 3/2$.
- » **Бозоны:** Частицы с целым спином называются *бозонами*. К ним относятся фотоны, пи-мезоны и другие элементарные частицы; даже гипотетические частицы, отвечающие за гравитационное взаимодействие – гравитоны, предположительно имеют целый спин. Например, пи-мезоны имеют спин $s = 0$, фотоны имеют $s = 1$, и так далее.

Более подробно об этих типах частиц я рассказываю в главе 4, а также в ближайшей врезке «Фермионы и бозоны в действии».

Таким образом, для электронов спиновые собственные состояния — это $|1/2, 1/2\rangle$ для электронов со спином вверх и $|1/2, -1/2\rangle$ для электронов со спином вниз. Для фотонов собственные состояния — это $|1, 1\rangle$, $|1, 0\rangle$ и $|1, -1\rangle$. Следовательно, возможные собственные состояния зависят от частицы, с которой вы работаете. В этой главе я в основном сосредоточусь на двух собственных состояниях электрона — спин вверх и спин вниз.

ФЕРМИОНЫ И БОЗОНЫ В ДЕЙСТВИИ

В этой главе основное внимание уделяется квантово-механическому понятию спина и связанным с ним уравнениям, но спин — это гораздо больше, чем просто число. Спиновое свойство частицы описывает определенные способы ее взаимодействия с другими идентичными частицами, о чем я более подробно расскажу в главе 15.

Фермионы обычно представляют частицы, которые рассматриваются как физические объекты или частицы материи. Они также подразделяются на категории.

- **Лептоны:** Фундаментальные частицы материи, наиболее известной из которых является электрон. К ним также относятся более тяжелые мюоны и тау-частицы. С каждой из этих частиц также связаны нейтрино (которые тоже являются лептонами): электронное нейтрино, мюонное нейтрино и тау-нейтрино.
- **Кварки:** Кварки являются фундаментальными частицами, которые никогда не существуют изолированно, а могут быть обнаружены только в связанном состоянии, образуя другие частицы. Все частицы, состоящие из кварков, называются *адронами*. О суще-

ствовании кварков в основном судят по тому, как адроны распадаются и воссоединяются, что особенно хорошо наблюдается в экспериментах на ускорителях частиц. Поскольку каждый кварк имеет полуцелый спин, эти составные адроны могут быть как фермионами, так и бозонами.

- **Барионы:** Когда кварки объединяются, образуя адрон с полуцелым спином, результат называется *барионом*. Наиболее яркими примерами являются протон и нейтрон.

Бозоны обычно представляют частицы, которые рассматриваются как частицы-переносчики взаимодействий, поскольку фундаментальные бозоны связаны с важнейшими силами в физике.

- **Фотон:** Частица со спином 1, известная как частица света. Помимо переноса световой энергии, это также частица, которая осуществляет электромагнитное взаимодействие между заряженными частицами.
- **Слабый бозон:** Частица со спином 1, которая осуществляет слабое ядерное взаимодействие. Существуют два заряженных слабых бозона, W^+ и W^- , а также нейтральный слабый бозон Z^0 .
- **Глюон:** Частица со спином 1, которая осуществляет сильное ядерное взаимодействие, удерживая кварки вместе для образования адронов (таких как протоны и нейтроны), а также удерживая адроны вместе (например, удерживая протоны и нейтроны в атомных ядрах).
- **Бозон Хиггса:** Частица со спином 0, предсказанная в 1963 году и обнаруженная на Большом адронном коллайдере в 2013 году, которая объясняет определенные свойства Стандартной модели физики частиц.
- **Мезон:** Когда кварки объединяются, образуя адрон с целочисленным значением спина, результат называется *мезоном*. Примерами являются пионы и каоны, хотя они редко встречаются за пределами ускорителей частиц и связанных с ними высокоэнергетических событий.

Поскольку *гравитон* еще не обнаружен, я не включил его в список бозонов. Эта частица является чисто гипотетическим бозоном, который должен осуществлять гравитационное взаимодействие – единственную фундаментальную силу в физике, которая не передается через один из известных (и экспериментально подтвержденных) бозонов. Люди, стремящиеся разработать *теорию квантовой гравитации* – которая объяснила бы гравитацию в тех же квантовых терминах, используемых для описания остальной современной физики – иногда применяют концепцию гравитона как способ подхода к этой проблеме. Однако то, что эта частица до сих пор не обнаружена, является существенным препятствием.

Операторы спина: Беготня вокруг углового момента

Поскольку спин является разновидностью собственного углового момента, операторы спина имеют много общего с операторами орбитального углового момента. В главе 10 я обсуждаю операторы орбитального углового момента L^2 и L_z , и, как можно ожидать, существуют аналогичные операторы спина, S^2 и S_z . Однако эти операторы являются просто операторами; они не имеют дифференциальной формы, как операторы орбитального углового момента (что означает, что вы не сможете найти для них собственные функции).

Определение операторов спина

Фактически, все операторы орбитального момента импульса, такие как L_x , L_y и L_z , имеют здесь свои аналоги: S_x , S_y и S_z . Коммутационные соотношения между L_x , L_y и L_z выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \gg [L_x, L_y] &= i\hbar L_z \\ \gg [L_y, L_z] &= i\hbar L_x \\ \gg [L_z, L_x] &= i\hbar L_y \end{aligned}$$

И они работают точно так же для спина:

$$\begin{aligned} \gg [S_x, S_y] &= i\hbar S_z \\ \gg [S_y, S_z] &= i\hbar S_x \\ \gg [S_z, S_x] &= i\hbar S_y \end{aligned}$$

Оператор L^2 , примененный к собственному состоянию орбитального момента импульса, дает следующий результат:

$$L^2 |\ell, m\rangle = \ell(\ell + 1)\hbar^2 |\ell, m\rangle$$

И, как и следовало ожидать, оператор S^2 работает аналогичным образом:

$$S^2 |s, m\rangle = s(s + 1)\hbar^2 |s, m\rangle$$

Оператор L_z , примененный к собственному состоянию орбитального момента импульса (см. Главу 10), дает:

$$L_z |\ell, m\rangle = m\hbar |\ell, m\rangle$$

И, по аналогии, оператор S_z работает так:

$$S_z |s, m\rangle = m\hbar |s, m\rangle$$

Повышающие и понижающие операторы спина

А как насчет повышающих и понижающих операторов, L_+ и L_- ? Существуют ли аналоги для спина? В терминах момента импульса L_+ и L_- работают следующим образом, как было показано в предыдущей главе:

$$\begin{aligned} \gg L_+ |\ell, m\rangle &= \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)} |\ell, m+1\rangle \\ \gg L_- |\ell, m\rangle &= \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)} |\ell, m-1\rangle \end{aligned}$$

Существуют также спиновые повышающие и понижающие операторы (S_+ и S_-), и они работают точно так же, используя квантовое число s вместо ℓ :

$$\begin{aligned} \gg S_+ |s, m\rangle &= \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m+1)} |s, m+1\rangle \\ \gg S_- |s, m\rangle &= \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m-1)} |s, m-1\rangle \end{aligned}$$

Работа со спином $1/2$ и матрицами Паули

Частицы со спином $1/2$ (фермионы) требуют особого внимания. Собственные значения оператора S^2 в этом случае равны:

$$S^2 |s, m\rangle = s(s+1) \hbar^2 |s, m\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |s, m\rangle$$

А собственные значения оператора S_z равны:

$$S_z |s, m\rangle = m \hbar |s, m\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |s, m\rangle$$

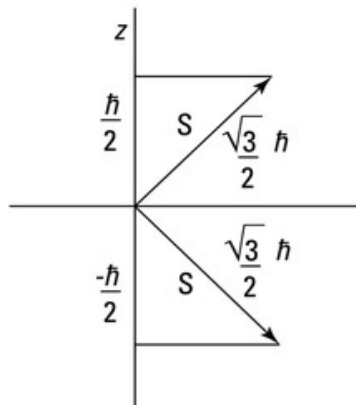


РИСУНОК 11-2:

Величина спина и его проекция на ось z .

Эти два уравнения можно представить графически, как показано на рисунке 11-2, где два спиновых состояния имеют разные проекции вдоль оси z .

Матрицы спина $1/2$

Пришло время рассмотреть спиновые собственные состояния и операторы для частиц со спином $1/2$ в матричном представлении. Существует только два возможных состояния — спин вверх и спин вниз, поэтому это довольно просто.

Собственные состояния спина вверх и вниз

В матричном формате элементы будут соответствовать положительному и отрицательному спинам. Когда спин положительный, первый элемент будет равен 1, а второй — 0. Когда спин отрицательный, числа будут противоположными. Вот как выглядят спиновые собственные состояния в таком представлении:

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Матричный оператор S^2

Теперь рассмотрим спиновые операторы, например S^2 . В матричном виде оператор S^2 выглядит следующим образом:

$$S^2 = \begin{bmatrix} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| S^2 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| S^2 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| S^2 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| S^2 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{bmatrix}$$

Умножение векторов спина вверх и вниз дает 0, поэтому элементы справа вверху и слева внизу станут равными 0. Поскольку векторы нормированы, это означает, что элементы слева вверху и справа внизу будут константами. В результате получаем:

$$S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Матричный оператор S_z

Аналогично можно представить оператор S_z в матричной форме:

$$S_z = \begin{bmatrix} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| S_z \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| S_z \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| S_z \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| S_z \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{bmatrix}$$

Что дает:

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Эта матричная версия S_z позволяет найти z -компоненту спина собственного состояния. Для состояния спина вниз вы применяете оператор в матричной форме, решаете матричное умножение и затем можете перевести обратно в обозначения Дирака:

$$S_z \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

Повышение и понижение спина с помощью матриц

А как насчет операторов повышения и понижения S_+ и S_- ? Помните, что должно происходить при применении этих операторов к различным собственным состояниям спина электрона:

- » Оператор повышения S_+ на состоянии спина вниз → Состояние спина вверх
- » Оператор повышения S_+ на состоянии спина вверх → Ноль
- » Оператор понижения S_- на состоянии спина вверх → Состояние спина вниз
- » Оператор понижения S_- на состоянии спина вниз → Ноль

В матричной форме эти операторы выглядят так:

$$S_+ = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$
$$S_- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Например, вы можете использовать эту матрицу, чтобы проверить, что происходит при применении оператора повышения S_+ к вектору спина вниз (определенному в разделе «Собственные состояния спина вверх и вниз»). Какой результат вы ожидаете получить? (совет: Обратитесь к предыдущему списку. При применении оператора повышения к вектору спина вниз вы должны получить собственное состояние спина вверх.)

Матрицы Паули

Иногда операторы S_x , S_y и S_z записывают через матрицы Паули σ_x , σ_y и σ_z . Вот как выглядят матрицы Паули:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Теперь вы можете записать S_x , S_y и S_z через матрицы Паули следующим образом:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$$

Уф! На этом завершается наше рассмотрение спина.

4

**ПЕРЕХОД
К ТРЕХМЕРНЫМ
ВЫЧИСЛЕНИЯМ
КВАНТОВОЙ
ФИЗИКИ**

В ЭТОЙ ЧАСТИ...

Узнаете, как решать задачи по квантовой физике в прямоугольных координатах.

Решите задачи квантовой физики, записанные в сферических координатах.

Изучите структуру атома водорода с помощью квантовой физики.

Выйдите за рамки базовых задач и подумайте о том, как взаимодействуют несколько частиц.

- » Исследование уравнения Шрёдингера в измерениях x , y и z
- » Работа со свободными частицами в 3D
- » Работа с прямоугольными потенциалами
- » Видение гармонических осцилляторов в трехмерном пространстве

Глава 12

Прямоугольные координаты: решение задач в трехмерном пространстве

Одномерные задачи хороши и полезны, но реальный мир трехмерен. Физики очень любят начинать с более простых одномерных задач, а затем расширять их до многомерных. В этой главе мы оставляем позади одномерные потенциалы и начинаем рассматривать бесспиновые квантово-механические частицы в трех измерениях. Здесь вы будете работать с тремя измерениями в прямоугольных координатах, начиная с рассмотрения уравнения Шрёдингера во всей его трехмерной красе. Затем вы погрузитесь в изучение свободных частиц, потенциальных ям и гармонических осцилляторов, также в трехмерном пространстве.

Примечание: Эта глава во многом опирается на главы 8 и 9, переходя от одномерных случаев энергетических ям и гармонических осцилляторов к их рассмотрению в трех измерениях. Как и в тех случаях, для понимания материала этой главы вам необходимо уверенно владеть математическим анализом и дифференциальными уравнениями, а также некоторыми основами тригонометрии.

Уравнение Шрёдингера в 3D

Я представил уравнение Шрёдингера в главе 3, но в этой главе мы рассмотрим его во всей трехмерной полноте.



ЗАПОМНИ

Гамильтониан — это название оператора энергии $\hat{H}$. Когда вы применяете $\hat{H}$ к волновой функции, он возвращает энергию E этой волновой функции. Скалярная величина E является уровнем энергии, который также является собственным значением оператора $\hat{H}$. (См. главу 7 для этих вычислений и их применения при выводе уравнения Шрёдингера.)

Преобразование уравнения Шрёдингера в прямоугольные координаты

В одном измерении зависящее от времени уравнение Шрёдингера (см. главу 8 для информации о временной зависимости) выглядит так:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r, t) + V(r, t) \psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t)$$

Это уравнение уже трехмерно, поскольку $\mathbf{r}$ представляет собой вектор положения в трех измерениях. Вы можете преобразовать его в прямоугольные координаты, $\psi(r, t) = \psi(x, y, z, t)$. Теперь нужно также по-новому взглянуть на оператор Лапласа (который служит для взятия производной по каждой переменной), ∇^2 :

$$\nabla^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

Применяя лапласиан к уравнению в прямоугольных координатах, вы получаете трехмерное уравнение Шрёдингера:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z, t) + V(r) \psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z, t)$$

А вот трехмерное уравнение Шрёдингера с использованием лапласиана, что выглядит более компактно:

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

Чтобы решить это уравнение, когда потенциал не меняется со временем, выделите зависящую от времени часть волновой функции:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-iEt/\hbar}$$

Здесь $\psi(x, y, z)$ является решением не зависящего от времени уравнения Шрёдингера, а E — энергия:

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

Пока все хорошо. Но теперь вы столкнулись с препятствием. Выражение для лапласиана, $\nabla^2 \psi(x, y, z)$, сложно для работы, поэтому текущее уравнение в общем случае трудно решить.

Разделение уравнения Шрёдингера

Что же делать с трудноразрешимым уравнением из предыдущего раздела? Можно сосредоточиться на случае, когда уравнение является *разделяемым* — то есть, когда можно разделить зависимость от x , y и z и найти решение для каждого измерения отдельно. Другими словами, в разделяемых случаях потенциал $V(x, y, z)$ фактически является суммой потенциалов по x , y и z :

$$V(x, y, z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$$

Теперь вы можете разбить гамильтониан в зависящем от времени уравнении Шрёдингера на три гамильтониана, H_x , H_y и H_z :

$$(H_x + H_y + H_z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

где

$$\left\{ \begin{array}{l} \gg H_x = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x) \\ \gg H_y = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_y(y) \\ \gg H_z = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) \end{array} \right.$$

Когда вы разделяете гамильтониан, как в $(H_x + H_y + H_z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$, вы также можете разделить волновую функцию, которая решает это уравнение. В частности, вы можете разбить волновую функцию на три части, по одной для x , y и z :

$$\psi(x, y, z) = X(x) Y(y) Z(z)$$

где $X(x)$, $Y(y)$ и $Z(z)$ — функции координат x , y и z , которые не следует путать с операторами положения. Такое разделение волновой функции на три части значительно упрощает ваши вычисления, поскольку теперь вы можете разбить гамильтониан на три отдельных оператора,

которые складываются вместе, и получить три отдельных компонента энергии:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x) \right) + \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_y(y) \right) + \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) \right) = H$$

$$E = E_x + E_y + E_z$$

Теперь у вас есть три независимых (и также не зависящих от времени) уравнения Шрёдингера для трех измерений:

$$\begin{aligned} & \gg \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) + V(x)X(x) = E_x X(x) \\ & \gg \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) + V(y)Y(y) = E_y Y(y) \\ & \gg \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) + V(z)Z(z) = E_z Z(z) \end{aligned}$$



ПОДСКАЗКА

Эта система независимых дифференциальных уравнений выглядит намного проще для решения, чем $(H_x + H_y + H_z)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$. По сути, вы разбили трехмерное уравнение Шрёдингера на три одномерных уравнения Шрёдингера. Это делает решение трехмерных задач выполнимым.

Решение для свободной частицы в 3D

Рассмотрим свободную частицу, показанную в трех измерениях на рисунке 12-1.

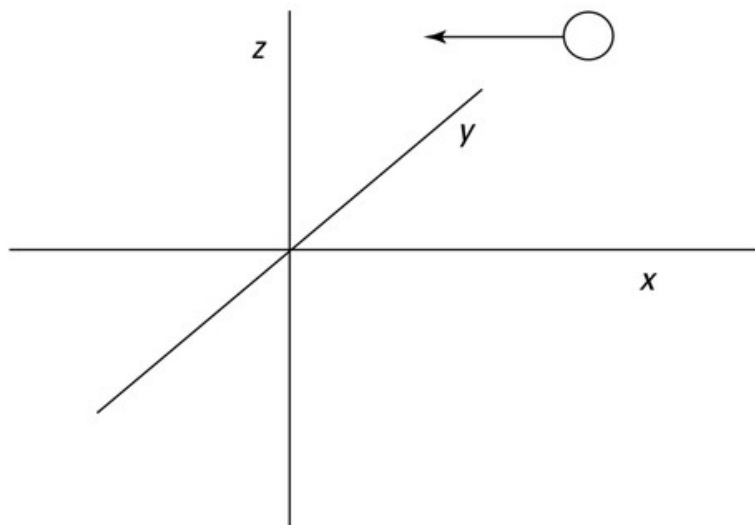


РИСУНОК 12-1.

Свободная частица в трехмерном пространстве.

Чтобы решить задачу для свободной частицы, показанной на рисунке, можно применить следующие шаги (представленные в главе 8):

1. Определить координаты для записи уравнения Шрёдингера.

Основная работа для этой части была проделана в предыдущем разделе. Поскольку эта глава посвящена прямоугольным координатам, неудивительно, что здесь для записи уравнения Шрёдингера используются прямоугольные координаты. Затем разделение координат создает три одномерных уравнения Шрёдингера.

2. Применить конкретные ограничения; упростить, если возможно.

Поскольку частица движется свободно, $V(x) = V(y) = V(z) = 0$. Нет потенциальной энергии, влияющей на движение частицы. Три независимых уравнения Шрёдингера для трех измерений (рассмотренные в предыдущем разделе) принимают следующий вид:

- $\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = E_x X(x)$
- $\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) = E_y Y(y)$
- $\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) = E_z Z(z)$

3. Преобразовать уравнение Шрёдингера в разрешимую форму.

Если переписать эти уравнения через волновое число k , где $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, то эти уравнения примут следующий вид:

- $\frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = -k_x^2 X(x)$
- $\frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) = -k_y^2 Y(y)$
- $\frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) = -k_z^2 Z(z)$

4. Решите дифференциальные уравнения для ψ .

В данном случае волновая функция ψ представлена в разделенном виде как независимые компоненты X , Y и Z . Нужно решить уравнение для каждой из этих компонент, а затем объединить решения, чтобы получить ψ .

Координатные функции $X(x)$, $Y(y)$ и $Z(z)$ представлены тройкой дифференциальных уравнений второго порядка. Важно помнить, что это координатные функции, а не операторы положения.



ЗАПОМНИ

Общие решения можно записать как:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = -k_x^2 X(x) \rightarrow X(x) = A_x e^{ik_x x}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) = -k_y^2 Y(y) \rightarrow Y(y) = A_y e^{ik_y y}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) = -k_z^2 Z(z) \rightarrow Z(z) = A_z e^{ik_z z}$$

где A_x , A_y и A_z – константы.

Поскольку $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$, получаем следующее уравнение:

$$\psi(x, y, z) = A_x A_y A_z e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = A e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$$

где $A = A_x A_y A_z$.

Часть показателя экспоненты в скобках представляет собой *скалярное произведение* векторов k и r , $k \cdot r$. Если вектор $a = (a_x, a_y, a_z)$ задан в компонентах и вектор $b = (b_x, b_y, b_z)$, то их скалярное произведение $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z$. Скалярное произведение двух векторов является скалярной величиной.

Волновую функцию $\psi(x, y, z)$ можно переписать следующим образом:

$$\psi(x, y, z) = A e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

5. Используйте граничные условия и нормировку для нахождения констант.

После того, как вы получили волновую функцию, вам нужно найти константы. Об этом этапе вы узнаете в разделе «Поиск физического решения» далее в этой главе. Но сначала давайте рассмотрим энергию в данной ситуации.

Нахождение уравнения полной энергии

Полная энергия свободной частицы представляет собой сумму энергий по трем измерениям:

$$E = E_x + E_y + E_z$$

Для свободной частицы энергия x -компоненты волновой функции равна $\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} = E_x$. И это уравнение работает аналогичным образом для y и z компонент, поэтому полная энергия частицы:

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

Заметим, что $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ представляет собой квадрат модуля вектора k — то есть $k \cdot k = k^2$. Следовательно, уравнение для полной энергии можно записать как:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$



ЗАПОМНИ

Поскольку E является константой независимо от направления частицы (на какой оси она находится), существует множество состояний k с одинаковой энергией. Фактически, существует бесконечное число энергетических состояний. Все собственные функции, представленные дифференциальными уравнениями, которые вы находите в шаге 3 предыдущего раздела, бесконечно вырождены при изменении k_x , k_y и k_z .

Добавление временной зависимости

Вы можете добавить временную зависимость к решению для $\psi(x, y, z)$, получив:

$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)e^{-iEt/\hbar}$ (аналогично зависящему от времени уравнению Шрёдингера из главы 8). Это уравнение дает следующую форму для $\psi(x, y, z, t)$:

$$\psi(x, y, z, t) = Ae^{i(k \cdot r - Et/\hbar)}$$

Поскольку $\omega = \frac{E}{\hbar}$, уравнение принимает вид:

$$\psi(x, y, z, t) = Ae^{i(k \cdot r - \omega t)}$$

Фактически, теперь, когда правая часть уравнения выражена через радиус-вектор $\mathbf{r}$, вы можете сделать левую часть соответствующей этой величине:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(k \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$$

Поиск физического решения

Теперь, когда у вас есть волновая функция, вы можете попытаться нормировать ее (приравняв сумму вероятностной функции по всему пространству к единице), чтобы найти константы. К сожалению, для приравнивания интеграла к единице, интегрирование этой волновой функции дает следующее выражение, где A — константа:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\mathbf{r}, t) \psi^*(\mathbf{r}, t) d^3r = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d^3r \rightarrow \infty$$

Этот интеграл расходится, и вы не можете нормировать $\psi(\mathbf{r}, t)$ в том виде, как я его записал. Похоже, что эта волновая функция дает решение, которое физически невозможно! Что же делать, чтобы получить физическую частицу?



ПОДСКАЗКА

Здесь может быть полезно заглянуть в раздел главы 8, где я обсуждаю одномерное уравнение Шрёдингера для свободной частицы, а затем следовать этим шагам:

1. Преобразовать волновую функцию в волновой пакет.



ПОДСКАЗКА

Ключ к решению этой проблемы – осознание того, что если у вас есть несколько решений уравнения Шрёдингера, то любая линейная комбинация этих решений также является решением. Другими словами, вы складываете различные волновые функции так, чтобы получить *волновой пакет*, который представляет собой набор волновых функций вида $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, таких что:

- Волновые функции интерферируют конструктивно в одном месте.
- Они интерферируют деструктивно (обращаются в ноль) во всех остальных точках.

Рассмотрим стационарную версию:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n e^{i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{r}}$$

Однако для свободной частицы энергетические состояния не разделены на отдельные зоны; возможные энергии непрерывны, поэтому эту сумму записывают в виде интеграла:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3k$$

2. Выберите форму для ϕ .

Что такое $\phi(\mathbf{k})$? Это трехмерный аналог $\phi(k)$, который вы находите в главе 8; то есть это амплитуда каждой компонентной волновой функции. Вы можете найти $\phi(\mathbf{k})$ из преобразования Фурье следующим образом:

$$\phi(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3r$$

На практике вы сами выбираете $\phi(\mathbf{k})$. Рассмотрим пример, используя следующую форму для $\phi(\mathbf{k})$, которая описывает гауссов волновой пакет (Примечание: Экспоненциальная часть делает эту форму гауссовой):

$$\phi(k) = \phi(k) = A \exp\left(\frac{-a^2 k^2}{4}\right)$$

где a и A – константы.

3. Нормируйте ϕ для определения констант.

Можно начать с нормировки $\phi(k)$ для определения A . Вот как это работает:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(k)|^2 d^3k = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-a^2 k^2}{2}\right) d^3k$$

После выполнения интегрирования получаем:

$$1 = |A|^2 \left(\frac{2\pi}{a^2}\right)^{3/2}$$

$$A = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{3/4}$$

что означает, что волновая функция имеет вид:

$$\psi(r, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{3/4} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-a^2 k^2}{2}\right) e^{ik \cdot r} d^3k$$

4. Проинтегрируйте для нахождения ψ .

Вы можете вычислить это уравнение, что даст следующее выражение для стационарной волновой функции гауссова волнового пакета в 3D:

$$\psi(r, t) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{3/4} \exp\left(\frac{-r^2}{a^2}\right)$$

Хорошо, так выглядит решение при $V(r) = 0$. Но разве нельзя решить некоторые задачи, когда $V(r)$ не равно нулю? Да, конечно, можно. Рассмотрим это в следующем разделе.

Разбираемся с трехмерным прямоугольным потенциалом

В этом разделе рассматривается трехмерный потенциал, образующий ящик, как показано на рисунке 12-2. Мы хотим получить волновые функции и энергетические уровни для трехмерных потенциальных

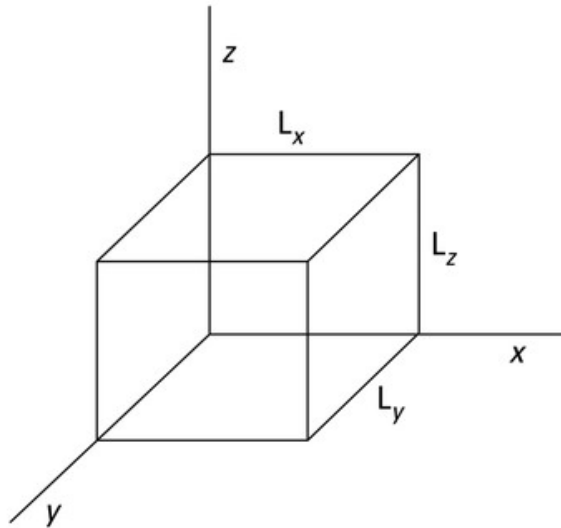


РИСУНОК 12-2:
Потенциал ящика в трехмерном пространстве.

ям аналогично тому, как это было сделано для одномерных потенциальных ям в главе 8. Будем следовать тем же шагам.

1. **Определим координаты для записи уравнения Шрёдингера.**
2. **Применим конкретные ограничения; упростим, где возможно.**

Внутри ящика положим $V(x, y, z) = 0$, а снаружи ящика $V(x, y, z) = \infty$.

Имеем следующее:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{где } 0 < x < L_x, 0 < y < L_y, 0 < z < L_z \\ \infty & \text{иначе} \end{cases}$$

Разделяя $V(x, y, z)$ на $V_x(x)$, $V_y(y)$ и $V_z(z)$, получаем:

- $V_x(x) = \begin{cases} 0, & \text{где } 0 < x < L_x \\ \infty & \text{иначе} \end{cases}$
- $V_y(y) = \begin{cases} 0, & \text{где } 0 < y < L_y \\ \infty & \text{иначе} \end{cases}$
- $V_z(z) = \begin{cases} 0, & \text{где } 0 < z < L_z \\ \infty & \text{иначе} \end{cases}$

Поскольку потенциал стремится к бесконечности на стенках ящика, волновая функция $\psi(x, y, z)$ должна обращаться в ноль на стенках – это наше ограничение. В трехмерном случае уравнение Шрёдингера выглядит следующим образом (можно выписать различные компоненты лапласиана ∇^2 для получения эквивалентной формы):

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

3. Преобразуем уравнение Шрёдингера в разрешимую форму.

Рассмотрим его отдельно по измерениям. Поскольку потенциал разделяется, можно записать $\psi(x, y, z)$ в виде произведения: $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$. Внутри ящика потенциал равен нулю. Поэтому уравнение Шрёдингера для координат x , y и z внутри ящика будет таким же, как для свободных частиц, и вы получите три одинаковых уравнения Шрёдингера:

- $\frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = -k_x^2 X(x)$
- $\frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) = -k_y^2 Y(y)$
- $\frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) = -k_z^2 Z(z)$

Помните, что волновое число k определяется как $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

4. Решаем дифференциальное уравнение для ψ .

Волновую функцию ψ можно разделить на независимые части, поэтому сначала рассмотрим одну часть, а затем распространим этот подход на остальные. Начнем с уравнения для x . Теперь у нас есть с чем работать – дифференциальное уравнение второго порядка. Вот два независимых решения этого уравнения, $X_1(x)$ и $X_2(x)$, где A и B пока не определены:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = -k_x^2 X(x) \rightarrow \begin{cases} X_1(x) = A \sin(kx) \\ X_2(x) = B \cos(kx) \end{cases}$$

Общее решение представляет собой сумму этих двух уравнений:

$$X(x) = X_1(x) + X_2(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

5. Используем граничные условия и нормировку для нахождения констант.

Необходимо использовать граничные условия для нахождения значений A и B . Каковы граничные условия? Волновая функция должна обращаться в ноль на границах ящика, поэтому:

- $X(0) = 0$
- $X(L_x) = 0$



ЗАПОМНИ

При решении для констант важную роль играет тригонометрия из-за синусов и косинусов. Условие $\psi(0) = 0$ сразу говорит нам, что B должно быть равно 0, поскольку $\cos(0) = 1$. Остальные вычисления я рассмотрю в разделе «Нормировка волновой функции» позже в этой главе. Но сначала давайте еще раз кратко рассмотрим энергетические уровни.

Определение энергетических уровней

Из граничных условий в предыдущем разделе, условие $X(L_x) = 0$ означает, что $X(L_x) = A \sin(k_x L_x) = 0$. Поскольку синус равен 0, когда его аргумент кратен π , это означает:

$$k_x L_x = n_x \pi$$

$$k_x = \frac{n_x \pi}{L_x}, \text{ где } n_x = 1, 2, 3 \dots$$

И поскольку $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, это означает:

$$\frac{2mE_x}{\hbar^2} = \frac{n_x^2 \pi^2}{L_x^2}, \text{ где } n_x = 1, 2, 3 \dots$$

$$E_x = \frac{n_x^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_x^2}$$

Это энергия x-компоненты волновой функции, соответствующая квантовым числам 1, 2, 3 и так далее. Полная энергия частицы массы m внутри потенциального ящика равна $E = E_x + E_y + E_z$. Аналогично

$$E_x = \frac{n_x^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_x^2}, \text{ для } E_y \text{ и } E_z \text{ имеем:}$$

$$E_y = \frac{n_y^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_y^2}, \text{ где } n_y = 1, 2, 3 \dots$$

$$E_z = \frac{n_z^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_z^2}, \text{ где } n_z = 1, 2, 3 \dots$$

Полная энергия частицы $E = E_x + E_y + E_z$ равна:

$$E = \frac{n_x^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_x^2} + \frac{n_y^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_y^2} + \frac{n_z^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_z^2}$$

где $n_x = 1, 2, 3 \dots$, $n_y = 1, 2, 3 \dots$, и $n_z = 1, 2, 3 \dots$

И вот вы получили полную энергию частицы в потенциале ящика.

Нормировка волновой функции

А что насчет теперь отнормировать волновую функцию $\psi(x, y, z)$? Можете обратиться к Шагу 1 в разделе «Разбираемся с трехмерными прямоугольными потенциалами». Возьмите уравнение из Шага 4

и примените найденную в Шаге 5 константу $B = 0$. Теперь для волнового уравнения по координате x у вас есть:

$$X(x) = A \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right)$$

Волновая функция представляет собой синусоидальную волну, обращающуюся в ноль при $x = 0$ и $x = L_x$. Технически следующие шаги являются продолжением Шага 5 из упомянутого списка, но путь от него до окончательной волновой функции состоит из нескольких этапов. Поэтому я проведу вас через эти этапы с помощью нового набора шагов — просто чтобы все было понятно.

1. Нормируем X для нахождения A .

Вы также можете потребовать, чтобы волновая функция была нормирована следующим образом:

$$1 = \int_0^{L_x} |X(x)|^2 dx$$

Нормируя волновую функцию, вы можете найти неизвестную константу A . Подставляя $X(x)$ в уравнение, получаете:

$$1 = |A|^2 \int_0^{L_x} \sin^2\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) dx$$

$$\int_0^{L_x} \sin^2\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) dx = \frac{L_x}{2}$$

Следовательно, $1 = |A|^2 \int_0^{L_x} \sin^2\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) dx$, $1 = |A|^2 \frac{L_x}{2}$, откуда можно найти A :

$$A = \sqrt{\frac{2}{L_x}}$$

Отлично, теперь у вас есть константа A , так что вы можете записать $X(x)$:

$$X(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \quad n_x = 1, 2, 3 \dots$$

2. Повторяем этот процесс для нахождения Y и Z .

Теперь найдем $\psi(x, y, z)$. Волновую функцию можно разделить на три части:

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$$

По аналогии с $X(x)$ можно найти $Y(y)$ и $Z(z)$:

$$Y(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right), \quad n_y = 1, 2, 3, \dots$$

$$Z(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right), \quad n_z = 1, 2, 3, \dots$$

3. Объединяем X , Y и Z для получения ψ .

Итак, $\psi(x, y, z)$ равняется следующему:

$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right)$$

где $n_x = 1, 2, 3, \dots$, $n_y = 1, 2, 3, \dots$, и $n_z = 1, 2, 3, \dots$

Это довольно длинная волновая функция. (Если вы последовательно читали предыдущие главы, то теперь понимаете, почему я предпочитаю рассматривать одномерные задачи, когда это возможно!) Фактически, когда вы имеете дело с потенциалом ящика, энергия выглядит так:

$$E = \frac{n_x^2 \hbar^2 \pi^2}{2m L_x^2} + \frac{n_y^2 \hbar^2 \pi^2}{2m L_y^2} + \frac{n_z^2 \hbar^2 \pi^2}{2m L_z^2}$$

Использование кубического потенциала

При работе с потенциалом ящика можно упростить задачу, предположив, что ящик на самом деле является кубом. Другими словами, $L = L_x = L_y = L_z$. Когда ящик является кубом, уравнение для энергии принимает вид:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

где $n_x = 1, 2, 3, \dots$, $n_y = 1, 2, 3, \dots$, и $n_z = 1, 2, 3, \dots$

Например, энергия основного состояния, где $n_x = n_y = n_z = 1$, задается следующим выражением, где E_{111} — энергия основного состояния:

$$E_{111} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2m L^2}$$

Вырожденные энергии и симметрия

Обратите внимание, что существует некоторое вырождение энергетических уровней. То есть, вы обнаружите различные энергетические уровни, которые будут идентичными. Например, заметьте, что

$$\begin{aligned} \gg E_{211}(n_x=2, n_y=1, n_z=1) &= E_{211} = \frac{6\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \\ \gg E_{121}(n_x=1, n_y=2, n_z=1) &= E_{121} = \frac{6\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \\ \gg E_{112}(n_x=1, n_y=1, n_z=2) &= E_{112} = \frac{6\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \end{aligned}$$

Таким образом, $E_{211} = E_{121} = E_{112}$, что означает, что первое возбужденное состояние является трехкратно вырожденным, что соответствует трехкратной эквивалентности размерностей.



ЗАПОМНИ

В общем случае, когда в физической структуре заложена симметрия (как в случае $L = L_x = L_y = L_z$), возникает вырождение. У вас есть отдельные физические конфигурации, которые идентичны другим физическим конфигурациям, поэтому они также имеют идентичные значения энергии.

Волновая функция для кубического потенциала

Волновая функция для кубического потенциала проще в обращении, чем волновая функция для обычного прямоугольного потенциала (где стороны имеют разную длину). Вот волновая функция для кубического потенциала:

$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{n_x\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_z\pi z}{L}\right)$$

где $n_x = 1, 2, 3, \dots$, $n_y = 1, 2, 3, \dots$, и $n_z = 1, 2, 3, \dots$

Например, вот волновая функция для основного состояния ($n_x = 1$, $n_y = 1$, $n_z = 1$), $\psi_{111}(x, y, z)$:

$$\psi_{111}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)$$

А вот $\psi_{211}(x, y, z)$:

$$\psi_{211}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)$$

И $\psi_{121}(x, y, z)$:

$$\psi_{121}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)$$

Пружиним в трехмерные гармонические осцилляторы

В одном измерении обобщенный гармонический осциллятор (который я описываю в главе 9) выглядит как показано на рисунке 12-3, где частица находится под действием возвращающей силы — изображенной здесь в виде пружины.

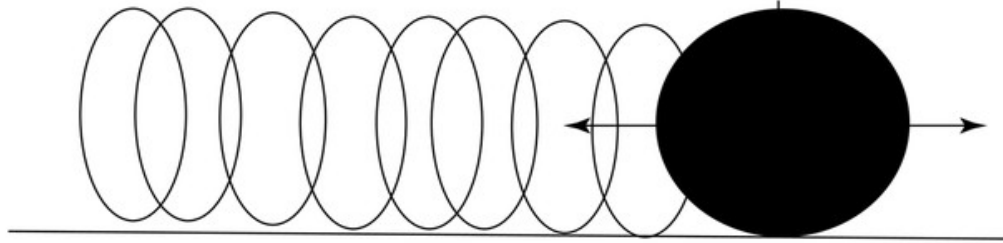


РИСУНОК 12-3.
Гармонический осциллятор.

Потенциал трехмерной пружины

Возвращающая сила в одном измерении имеет вид $F_x = -k_x x$, где k_x — коэффициент пропорциональности между силой, действующей на частицу, и положением частицы. Потенциальная энергия частицы как функция координаты x равна $V(x) = \frac{1}{2} k_x x^2$. Это также иногда записывают как:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2, \text{ где } \omega_x^2 = \frac{k_x}{m}.$$

В этом разделе мы рассмотрим гармонический осциллятор в трех измерениях. В трех измерениях потенциал выглядит так:

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2$$

$$\omega_x^2 = \frac{k_x}{m}, \quad \omega_y^2 = \frac{k_y}{m}, \quad \omega_z^2 = \frac{k_z}{m},$$

Решение уравнения Шрёдингера для трехмерной пружины

Теперь, когда у нас есть форма потенциала, мы можем начать работу с уравнением Шрёдингера:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Подставляя трехмерный потенциал $V(x, y, z)$, получаем следующее уравнение:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + \left(\frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 \right) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Рассмотрим измерение за измерением. Поскольку потенциал можно разделить на три измерения, мы можем записать $\psi(x, y, z)$ как $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$. Следовательно, уравнение Шрёдингера для x выглядит так:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 X(x) = E_x X(x)$$

Вы решаете это уравнение для одного измерения в главе 9, где получаете следующее решение:

$$X(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^{n_x} n_x! x_0}} H_{n_x} \left(\frac{x}{x_0} \right) \exp \left(-\frac{x^2}{2x_0^2} \right)$$

где $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_x}}$ и $n_x = 0, 1, 2$ и так далее.

Обозначение H_{n_x} указывает на полином Эрмита, который был представлен в главе 9. Волновую функцию можно записать следующим образом:

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{\pi^{3/4} \sqrt{2^{n_x+n_y+n_z} n_x! n_y! n_z! x_0 y_0 z_0}} H_{n_x} \left(\frac{x}{x_0} \right) H_{n_y} \left(\frac{y}{y_0} \right) H_{n_z} \left(\frac{z}{z_0} \right) \exp \left(-\frac{x^2}{2x_0^2} - \frac{y^2}{2y_0^2} - \frac{z^2}{2z_0^2} \right)$$

Это относительно простая форма волновой функции (хотя может показаться иначе), и она возможна благодаря тому, что потенциал можно разделить на три измерения.

Энергия трехмерного осциллятора

Что можно сказать об энергии гармонического осциллятора? Энергия одномерного гармонического осциллятора равна $E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$. По аналогии, энергия трехмерного гармонического осциллятора выражается как

$$E = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_z$$

Рассмотрим случай, когда $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$. Здесь направление измерения не имеет значения, поэтому такой осциллятор называется *изотропным гармоническим осциллятором*. В этом случае энергия выглядит так:

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

Как и для кубического потенциала, энергия трехмерного изотропного гармонического осциллятора является вырожденной. Например, $E_{112} = E_{121} = E_{211}$. Фактически, для трехмерного изотропного гармонического осциллятора возможно более чем трехкратное вырождение — например, $E_{200} = E_{020} = E_{002} = E_{110} = E_{101} = E_{011}$.



ЗАПОМНИ

В общем случае кратность вырождения трехмерного изотропного гармонического осциллятора равна

$$\text{Вырождение} = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

где $n = n_x + n_y + n_z$.

- » Использование сферических координат для решения задач
- » Написание уравнений для центральных потенциалов
- » Нахождение свободных частиц в сферических координатах
- » Работа с квадратными потенциальными ямами
- » Изучение изотропных гармонических осцилляторов

Глава 13

Решение задач в сферических координатах

Вы, вероятно, знакомы с широтой и долготой — координатами, которые по сути определяют пару углов, измеряемых с вершиной в центре Земли. Если объединить угол к востоку или западу, угол к северу или югу и, что особенно важно, расстояние от центра Земли, получится вектор, который хорошо описывает положение в трехмерном пространстве. Этот вектор является частью сферической системы координат.

Навигаторы чаще говорят о паре углов, чем о расстоянии (обычно достаточно указать «поверхность Земли»), но для физиков-квантовиков важны как углы, так и длина радиуса. В некоторых трехмерных задачах квантовой физики даже можно разложить волновую функцию на угловую и радиальную части.

В этой главе я рассматриваю трехмерные задачи, которые лучше всего решать в сферических координатах. (Трехмерные задачи, которые удобнее решать в прямоугольных координатах, рассматриваются в главе 12.)

Примечание: При решении задач в этой главе вы будете применять свои математические навыки, связанные с использованием сферических координат, особенно в контексте многомерного анализа и дифференциальных уравнений. А поскольку мы имеем дело со сферическими координатами, вам поможет знание тригонометрии, когда в уравнениях появятся синусы и косинусы.

Выбор сферических координат

В главе 12 я рассматриваю трехмерный прямоугольный потенциал и потенциальную яму, в которой захвачена частица. В этом случае используются прямоугольные координаты, поскольку трехмерный прямоугольный потенциал представляет собой прямоугольную призму и потенциал определен по каждому из трех координатных направлений. Можно даже упростить задачу, рассмотрев случай, когда яма имеет форму куба и потенциал одинаков по всем направлениям.

Но что, если потенциальная яма, в которой захвачена частица, обладает сферической симметрией, т.е. не является прямоугольной или кубической? Например, предположим, что потенциальная яма описывается следующим уравнением, где r — радиус положения частицы относительно начала координат, а a — константа:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{где } 0 < r < a \\ \infty & \text{иначе} \end{cases}$$

Пытаться втиснуть такую задачу в решение с прямоугольными координатами — значит, напрашиваться на неприятности, потому что, хотя решить ее таким способом можно, это потребует множества синусов и косинусов и приведет к довольно сложному решению. Гораздо лучшей тактикой будет решить эту задачу в естественной системе координат, в которой выражен потенциал: в сферических координатах.

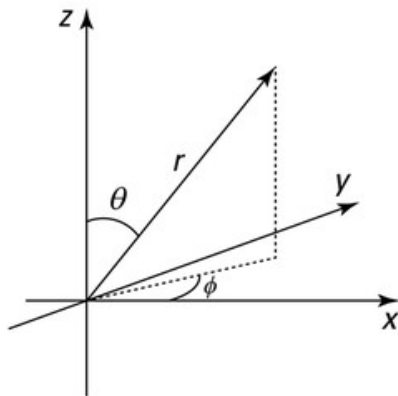


РИСУНОК 13-1.
Система сферических координат.



ЗАПОМНИ

На рисунке 13-1 показана сферическая система координат вместе с соответствующими прямоугольными координатами x , y и z . В сферической системе координат точки определяются радиус-вектором $\mathbf{r}$, который имеет три компоненты.

- » r : Длина радиус-вектора.
- » θ : Угол между осью z и вектором $\mathbf{r}$.

» ϕ : Угол между осью x и проекцией вектора $\mathbf{r}$ на плоскость $x-y$.



ПОДСКАЗКА

Когда вы используете сферические координаты для решения задач, которые *лучше всего выражаются в сферических координатах* (например, для радиально-симметричного потенциала), вам не обязательно выполнять преобразование между сферическими и прямоугольными координатами. Если же вы хотите быть готовыми к таким преобразованиям, обратитесь к информации в главе 10.

Рассматриваем центральные потенциалы в трех измерениях

В этой главе рассматриваются задачи с центрально-симметричными потенциалами. В таких сферически симметричных потенциалах вида $V(\mathbf{r}) = V(r)$ потенциал зависит только от величины вектора $\mathbf{r}$ (то есть от r), а не от его направления.

При решении задач с центральным потенциалом волновую функцию можно разделить на радиальную часть (которая зависит от формы потенциала) и угловую часть, представляющую собой сферическую гармонику. Если вы не уверены в своем понимании гармоник в квантовой физике, рекомендуем обратиться к главе 9. Квантовое гармоническое поведение — это один из типов задач, с которыми квантовая физика отлично справляется!

Разбираем уравнение Шрёдингера

Уравнение Шрёдингера в трехмерном пространстве выглядит следующим образом, где ∇^2 — оператор Лапласа (подробнее об операторах и введение в уравнение Шрёдингера см. в главе 7):

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

Оператор Лапласа является *дифференциальным оператором* (он дифференцирует то, на что действует), но его можно применять в соответствии с используемыми координатами. В этой книге я в основном работаю с оператором Лапласа в прямоугольных координатах. В сферических координатах он выглядит немного сложнее, но позже его можно упростить. Вот как выглядит оператор Лапласа в сферических координатах:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2$$

В этом уравнении L^2 — это квадрат *орбитального углового момента* (который, к сожалению, тоже довольно сложен):

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

В сферических координатах уравнение Шрёдингера для центрального потенциала после подстановки всех членов принимает вид:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \psi(r) + \frac{1}{2mr^2} L^2 \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r)$$



ЗАПОМНИ

Первый член в этом уравнении соответствует радиальной кинетической энергии — то есть кинетической энергии частицы, движущейся в радиальном направлении. Второй член соответствует вращательной кинетической энергии. А третий член соответствует *потенциальной энергии*.

Что можно сказать о решениях этой версии уравнения Шрёдингера? Давайте рассмотрим каждый член уравнения по отдельности.

- » $\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \psi(r)$: Этот первый член полностью основан на расстоянии r , а вторая производная связана с изменением этого расстояния. Этот член описывает изменение в радиальном направлении, движение либо к центру потенциальной ямы, либо от него. В целом этот член соответствует *радиальной кинетической энергии*. Он полностью независим от углов.
- » $\frac{1}{2mr^2} L^2 \psi(r)$: Этот второй член определяется через L^2 , который я описал ранее в этом разделе как квадрат орбитального момента импульса. Орбитальная кинетическая энергия волновой функции — это *кинетическая энергия вращения*, которая по своей природе полностью зависит только от углового изменения.
- » $V(r) \psi(r)$: Третий член — это потенциальная энергия. В случае этого центрального потенциала, как я также отметил ранее, потенциальная энергия зависит только от радиуса r . Как и первый член, этот член полностью не зависит от углов.

Можно заметить, что первый и третий члены зависят только от r , а второй член зависит только от углов. Это особое свойство задач с центральными потенциалами позволяет разделить их волновые функции на радиальную и угловую части.

Угловая часть $\psi(r, \theta, \phi)$

Что можно сказать об угловой части $\psi(r, \theta, \phi)$ при наличии центрального потенциала? Угловая часть должна быть собственной функцией L^2 , и, как я показываю в главе 10, собственными функциями L^2 являются сферические гармоники $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ (где ℓ — квантовое число полного момента импульса, а m — квантовое число z -компоненты момента импульса). Угловая часть волновой функции является сферической гармоникой.

Радиальная часть $\psi(r, \theta, \phi)$

Радиальную часть волновой функции можно обозначить как $R_{n\ell}(r)$, где n — квантовое число, соответствующее квантовому состоянию радиальной части волновой функции, а ℓ — квантовое число полного момента импульса. Радиальная часть симметрична относительно углов, поэтому она не может зависеть от m — квантового числа z -компоненты момента импульса. Другими словами, волновая функция для частиц в центральных потенциалах в сферических координатах выглядит следующим образом:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Следующий шаг — найти общее решение для $R_{n\ell}(r)$. Подставляя $\psi(r, \theta, \phi)$ из предыдущего уравнения в уравнение Шрёдингера, $\frac{-\hbar^2}{2mr^2} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r\psi(r) + \frac{1}{2mr^2} L^2 \psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$, получаем:

$$-\hbar^2 \frac{r}{R_{n\ell}(r)} \frac{d^2}{dr^2} [rR_{n\ell}(r)] + 2mr^2 [V(r) - E] + \frac{L^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi)}{Y_{\ell m}(\theta, \phi)} = 0$$

Заметим (из главы 10), что сферические гармоники являются собственными функциями L^2 (именно поэтому мы их используем) с собственным значением $\ell(\ell+1)\hbar^2$:

$$L^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Можно подставить это собственное значение в последний член предыдущей версии уравнения Шрёдингера, чтобы немного упростить его:

$$\frac{L^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi)}{Y_{\ell m}(\theta, \phi)} = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi)}{Y_{\ell m}(\theta, \phi)} = \ell(\ell+1)\hbar^2$$

Подставляя упрощенное собственное значение обратно в уравнение Шрёдингера, получаем:

$$-\hbar^2 \frac{r}{R_{n\ell}(r)} \frac{d^2}{dr^2} [rR_{n\ell}(r)] + 2mr^2 [V(r) - E] + \ell(\ell+1)\hbar^2 = 0$$

И перепишем в виде:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [rR_{n\ell}(r)] + \left[V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [rR_{n\ell}(r)] = E [rR_{n\ell}(r)]$$



ЗАПОМНИ

Это уравнение используется для определения радиальной части волновой функции $R_{n\ell}(r)$. Оно называется радиальным уравнением для центрального потенциала.

Когда вы решаете радиальное уравнение для $R_{n\ell}(r)$, вы можете найти $\psi(r, \theta, \phi)$, поскольку $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ уже известны:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$



ПОДСКАЗКА

Радиальное уравнение — это фактически дифференциальное уравнение в одном измерении: измерении r . Выбирая только задачи с центральными потенциалами, вы сводите общую задачу нахождения волновой функции частиц, захваченных в трехмерном сферическом потенциале, к одномерному дифференциальному уравнению.

Работа со свободными частицами в трехмерном пространстве

В этом и следующем разделах мы рассмотрим несколько примеров центральных потенциалов, чтобы понять, как решать радиальное уравнение (подробнее о радиальной части см. в предыдущем разделе). Здесь мы будем работать со свободной частицей в ситуации, когда на нее не действует вообще никакой потенциал.

Волновая функция в сферических координатах имеет следующий вид:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Мы уже знаем все о $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$, поскольку она дает нам сферические гармоники. Теперь задача состоит в том, чтобы найти радиальную часть $R_{n\ell}(r)$. Вот радиальное уравнение:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [rR_{n\ell}(r)] + \left[V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [rR_{n\ell}(r)] = E [rR_{n\ell}(r)]$$

Наша цель — решить радиальное уравнение для радиальной части волновой функции $R_{n\ell}(r)$, чтобы затем объединить ее с угловой частью $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ и получить полную волновую функцию $\psi(r, \theta, \phi)$. Для нахождения радиальной части волновой функции следуйте этим шагам:

1. Применить условие для потенциала.

Для свободной частицы $V(r) = 0$, поэтому радиальное уравнение принимает вид:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [rR_{n\ell}(r)] + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} [rR_{n\ell}(r)] = E [rR_{n\ell}(r)]$$

Даже в этой упрощенной ситуации вы получаете очередное громоздкое уравнение, поэтому можно предпринять шаги для его упрощения, чтобы сделать задачу более решаемой.

2. Выполните подстановку для упрощения.

Обычно в случае свободной частицы определяют $k = (2mE)^{1/2}/\hbar$ для упрощения уравнения. Однако в этом радиальном уравнении присутствует переменная r , поэтому вместо подстановки константы k в данном случае вы будете подставлять переменную ρ .

При этом нужно быть изобретательным в определении ρ , чтобы получить форму, которая упростит задачу на шагах 4 и 5. Переменная ρ пропорциональна r , и используемое определение будет $\rho = kr$. Это приводит к следующему соотношению:

$$\frac{\hbar^2}{2mr^2} = \frac{E}{\rho^2}$$

Вы можете подставить это новое соотношение в первые два члена правой части радиального уравнения, и теперь все члены будут содержать переменную E . Теперь можно сократить E во всех членах уравнения, что позволит решить его независимо от энергии. На одну переменную меньше, о которой нужно беспокоиться!

3. Уберите индекс n .

Поскольку версия одного и того же уравнения существует для каждого индекса n , вы можете удобно убрать индекс, так что $R_{n\ell}(r)$ станет $R_\ell(\rho)$.

4. Приравняйте радиальное уравнение к 0.

Подставляя значения из предыдущих шагов, выполняя некоторые алгебраические преобразования и проводя вычисления, получаем следующее радиальное уравнение:

$$\frac{d^2 R_\ell(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_\ell(\rho)}{d\rho} + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] R_\ell(\rho) = 0$$

5. Решите уравнение для $R_\ell(\rho)$.

Для последнего шага в этом списке на помощь приходят специальные типы функций. О них – сферических функциях Бесселя и Неймана – вы узнаете в следующем разделе.

Сферические функции Бесселя и Неймана

Радиальная часть уравнения

$$\frac{d^2 R_\ell(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_\ell(\rho)}{d\rho} + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] R_\ell(\rho) = 0$$

выглядит сложной, но решения оказываются хорошо известными. Это уравнение называется сферическим уравнением Бесселя, и его решение представляет собой комбинацию сферических функций Бесселя $[j_\ell(\rho)]$ и сферических функций Неймана $[n_\ell(\rho)]$:

$$R_\ell(\rho) = A_\ell j_\ell(\rho) + B_\ell n_\ell(\rho)$$

где A_ℓ и B_ℓ – константы.

Сферические функции Бесселя задаются уравнением:

$$j_\ell(\rho) = (-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\sin \rho}{\rho}$$

Вот как выглядят первые несколько итераций $j_\ell(\rho)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \gg j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho} \\ \gg j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho} \\ \gg j_2(\rho) = \frac{3 \sin \rho}{\rho^3} - \frac{3 \cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho} \end{array} \right.$$

А сферические функции Неймана задаются этим уравнением:

$$n_\ell(\rho) = -(-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\cos \rho}{\rho}$$

Вот первые несколько итераций $n_\ell(\rho)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \gg n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho} \end{array} \right.$$

$$\begin{aligned} \gg n_1(\rho) &= -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho} \\ \gg n_2(\rho) &= -\frac{3\cos \rho}{\rho^3} - \frac{3\sin \rho}{\rho^2} + \frac{\cos \rho}{\rho} \end{aligned}$$

Пределы для малых и больших ρ

Согласно сферическому уравнению Бесселя (см. предыдущий раздел), радиальная часть волновой функции для свободной частицы выглядит так:

$$R_\ell(\rho) = A_\ell j_\ell(\rho) + B_\ell n_\ell(\rho)$$

Рассмотрим сферические функции Бесселя и Неймана для малых и больших ρ .

» « При малых значениях ρ :

- Функции Бесселя сводятся к $j_\ell(\rho) \approx \frac{2^\ell \ell! \rho^\ell}{(2^\ell + 1)!}$
- Функции Неймана сводятся к $n_\ell(\rho) \approx \frac{-(2^\ell - 1)! \rho^{-\ell-1}}{2^\ell \ell!}$

» « При больших значениях ρ :

- Функции Бесселя сводятся к $j_\ell(\rho) \approx \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right)$
- Функции Неймана сводятся к $n_\ell(\rho) \approx -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right)$



Функции Неймана расходятся при малых значениях ρ . Следовательно, любая волновая функция, включающая функции Неймана, также расходится, что не соответствует реальной физической ситуации. Поэтому функции Неймана не являются приемлемыми функциями в волновой функции. Чтобы исключить влияние функции Неймана, можно положить $B_\ell = 0$, тогда функции Неймана не будут включены в волновую функцию, и останется только

$$R_\ell(\rho) = A_\ell j_\ell(\rho)$$

Теперь, когда радиальная компонента волновой функции упрощена до такой степени, вы можете объединить эту радиальную компоненту с угловыми компонентами. Подставляя $\rho = kr$ обратно, можно выразить волновую функцию $\psi(r, \theta, \phi)$ как:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(\rho)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = A_{\ell} j_{\ell}(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

где $k = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}$.

Заметим, что поскольку k может принимать любые значения, энергетические уровни являются непрерывными.

Работа со сферически-симметричной прямоугольной потенциальной ямой

Теперь рассмотрим случай сферически-симметричной прямоугольной потенциальной ямы, которую вы можете видеть на рисунке 13-2. (Я представил прямоугольные ямы в главе 8.) Этот потенциал захватывает частицы внутри себя. Математически прямоугольную потенциальную яму можно выразить следующим образом:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{где } 0 < r < a \\ 0, & \text{где } r > 0 \end{cases}$$

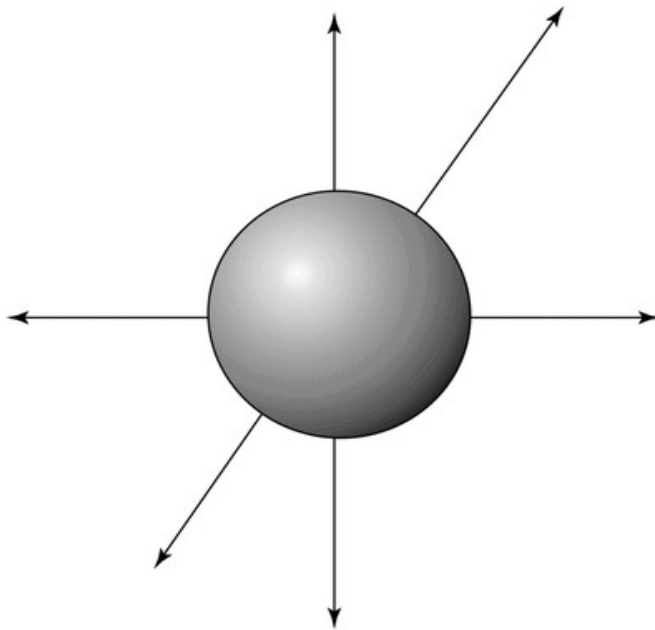


РИСУНОК 13-2.

Сферическая прямоугольная потенциальная яма.

Обратите внимание, что этот потенциал обладает сферической симметрией и меняется только по радиальной координате r , но не по углам θ или ϕ . Мы имеем дело с центральным потенциалом, поэтому волновую функцию можно разделить на угловую и радиальную части (см. раздел «Наблюдение центральных потенциалов в 3D» ранее в этой главе).



ПОДСКАЗКА

Да, я понимаю, что описываю сферически-симметричную ситуацию и называю ее «прямоугольной ямой». Как бы странно это ни звучало, такая терминология используется в квантовой физике, даже когда прямоугольная яма имеет сферическую форму. В следующих нескольких разделах я буду называть этот потенциал «прямоугольной ямой», но мы с вами оба знаем, что речь идет не о чем-то квадратном или даже кубическом, а о сфере.

Заглядываем внутрь прямоугольной ямы: $0 < r < a$

Для сферической прямоугольной потенциальной ямы радиальное уравнение в области $0 < r < a$ выглядит следующим образом:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [rR_{n\ell}(r)] + \left[V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [rR_{n\ell}(r)] = E [rR_{n\ell}(r)]$$

Здесь снова применим те же шаги, что и в предыдущем разделе для свободных частиц.

1. Применим ограничение на потенциал.

В этой области $V(r) = -V_0$, поэтому у вас есть:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [rR_{n\ell}(r)] + \left[-V_0 + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [rR_{n\ell}(r)] = E [rR_{n\ell}(r)]$$

Перенос члена V_0 в правую часть дает следующее:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [rR_{n\ell}(r)] + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} [rR_{n\ell}(r)] = (E + V_0) rR_{n\ell}(r)$$

В предвидении следующих шагов, я могу немного переписать это уравнение, умножив каждый член на $-2m/r\hbar^2$, чтобы упростить уравнение:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} [rR_{n\ell}(r)] - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R_{n\ell}(r) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) R_{n\ell}(r)$$

Это ставит вас в лучшую позицию для решения на следующих этапах.

2. Выполните подстановку для упрощения.

Теперь сделаем замену переменной $\rho = kr$ снова, но с другой формой ρ , чем та, что использовалась для свободных частиц. Частица захвачена в прямоугольной потенциальной яме, поэтому ее полная

энергия равна $E + V_0$, а не просто E . Это приводит к следующему соотношению:

$$\frac{\hbar^2}{2mr^2} = \frac{E + V_0}{\rho^2}$$

3. Уберите индекс n .

Этот шаг довольно тривиален, но его не стоит пропускать. Поскольку это уравнение существует для каждого индекса n , вы можете переписать его без индекса, и $R_{n\ell}(r)$ становится $R_\ell(\rho)$.

4. Приравняйте радиальное уравнение к 0.

Используя эту подстановку и сгруппировав все производные R вместе, радиальное уравнение принимает следующий вид:

$$\frac{d^2 R_\ell(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_\ell(\rho)}{d\rho} + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] R_\ell(\rho) = 0$$

5. Решите для $R_\ell(\rho)$.

Решением предыдущего уравнения является комбинация сферических функций Бесселя $[j_\ell(\rho)]$ и сферических функций Неймана $[n_\ell(\rho)]$ (как вы видели для свободной частицы в разделе «Работа со свободными частицами в 3D в сферических координатах»):

$$R_\ell(\rho) = A j_\ell(\rho) + B n_\ell(\rho)$$

В данном случае у вас также есть ограничение на возможные физические решения: волновая функция должна быть конечной везде. Эта ситуация ограничена областью $0 < r < a$, и поскольку $\rho = kr$, единственные пределы, которые нужно проверить, это малые значения ρ .

Для малых ρ функции Бесселя выглядят так:

$$j_\ell(\rho) \approx \frac{2^\ell \ell! \rho^\ell}{(2^\ell + 1)!}$$

А функции Неймана для малых ρ сводятся к

$$n_\ell(\rho) \approx \frac{-(2^\ell - 1)! \rho^{-\ell-1}}{2^\ell \ell!}$$

Функции Неймана расходятся при малых ρ , что делает их неприемлемыми для волновых функций в данном случае. Игнорирование функций Неймана означает, что радиальная часть волновой функции состоит только из сферических функций Бесселя, где A_ℓ — константа:

$$R_\ell(\rho) = A_\ell j_\ell(\rho)$$

Полная волновая функция внутри прямоугольной ямы, $\psi_{\text{inside}}(r, \theta, \phi)$, является произведением радиальной и угловой частей и выглядит так:

$$\psi_{\text{inside}}(r, \theta, \phi) = A_{\ell} j_{\ell}(\rho_{\text{inside}}) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

где $\rho_{\text{inside}} = \frac{r \sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}$, а $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ — сферические гармоники.

За пределами прямоугольной потенциальной ямы: $r > a$

За пределами потенциальной ямы, в области $r > a$, частица ведет себя как свободная частица. В конце концов, это область, где $V(r) = 0$. Вот как выглядит радиальное уравнение:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [r R_{n\ell}(r)] + \left[\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [r R_{n\ell}(r)] = E [r R_{n\ell}(r)]$$

Это уравнение вы решаете в разделе «Работа со свободными частицами в 3D в сферических координатах» ранее в этой главе. Поскольку $\rho = kr$, где $k = (2mE)^{1/2}/\hbar$, вы подставляете ρ вместо kr , так что $R_{n\ell}(r)$ становится $R_{\ell}(kr) = R_{\ell}(\rho)$. Используя эту подстановку, радиальное уравнение принимает следующий вид:

$$\frac{d^2 R_{\ell}(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_{\ell}(\rho)}{d\rho} + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] R_{\ell}(\rho) = 0$$

Решением является комбинация сферических функций Бесселя и сферических функций Неймана, где B_{ℓ} и C_{ℓ} — константы:

$$R_{\ell}(r) = B_{\ell} j_{\ell}(\rho_{\text{outside}}) + C_{\ell} n_{\ell}(\rho_{\text{outside}})$$



ПОДСКАЗКА

При решении для свободных частиц функция Неймана была нефизическим решением, поскольку она расходилась для крайне малых значений ρ . Однако в данном случае это уравнение применимо только в области $r > a$, поэтому функция Неймана не вносит никаких нефизических бесконечностей в волновую функцию. Таким образом, хотя вы исключили функцию Неймана для свободной частицы в пустом пространстве, вам не нужно исключать ее для свободной частицы за пределами потенциальной ямы.

Итак, радиальное решение за пределами прямоугольной ямы выглядит следующим образом, где $\rho_{\text{outside}} = r(2mE)^{1/2}/\hbar$:

$$\psi_{\text{outside}}(r, \theta, \phi) = [B_{\ell} j_{\ell}(\rho_{\text{outside}}) + C_{\ell} n_{\ell}(\rho_{\text{outside}})] Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Из предыдущего раздела вы знаете, что волновая функция внутри прямоугольной ямы имеет вид:

$$\psi_{\text{inside}}(r, \theta, \phi) = A_\ell j_\ell(\rho_{\text{inside}}) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Как найти константы A_ℓ , B_ℓ и C_ℓ ? Эти константы находятся через условия непрерывности: на границе внутренней и внешней областей, где $r = a$, волновая функция и ее первая производная должны быть непрерывны. Чтобы определить A_ℓ , B_ℓ и C_ℓ , нужно решить следующие два уравнения:

$$\left\{ \begin{array}{l} \gg \psi_{\text{inside}}(a, \theta, \phi) = \psi_{\text{outside}}(a, \theta, \phi) \\ \gg \left. \frac{d}{dr} \psi_{\text{inside}}(r, \theta, \phi) \right|_{r=a} = \left. \frac{d}{dr} \psi_{\text{outside}}(r, \theta, \phi) \right|_{r=a} \end{array} \right.$$

Теперь у вас есть общее решение для волновой функции при работе со сферической прямоугольной ямой потенциальной энергии. Вы можете использовать эти общие решения в конкретных ситуациях с определенными квантовыми конфигурациями для нахождения недостающих констант. Удачи!

Изучаем особенности изотропного гармонического осциллятора

В этом разделе рассматриваются *сферически симметричные* (это и есть его изотропный вариант) гармонические осцилляторы в трех измерениях. Глава 9 посвящена квантовым гармоническим осцилляторам в одном измерении, поэтому вам может быть полезно ознакомиться с соответствующими разделами той главы, прежде чем переходить к полной 3D-версии.

В одном измерении потенциал гармонического осциллятора записывается следующим образом:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

где $\omega^2 = \frac{k}{m}$ (здесь k — это константа упругости; то есть возвращающая сила гармонического осциллятора равна $F = -kx$). Вы можете преобразовать эти два уравнения в трехмерные версии гармонического потенциала, заменив x на r :

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$$

где $\omega^2 = \frac{k}{m}$. Поскольку этот потенциал сферически симметричен, волновая функция будет иметь следующий вид:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

где вам еще предстоит найти радиальную функцию $R_{n\ell}(r)$, а $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ описывает сферические гармоники.

Как вы можете понять, радиальное уравнение Шрёдингера выглядит так:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [r R_{n\ell}(r)] + \left[V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [r R_{n\ell}(r)] = E [r R_{n\ell}(r)]$$

Подставляя $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$, получаем:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [r R_{n\ell}(r)] + \left[\frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [r R_{n\ell}(r)] = E [r R_{n\ell}(r)]$$

Решение этого уравнения довольно сложно получить, и вы ничего не выиграете, проходя через все математические выкладки (на многие страницы), поэтому вот решение:

$$R_{n\ell}(r) = C_{n\ell} r^\ell \exp\left(-m\omega \frac{r^2}{2\hbar}\right) L_n^{\ell+\frac{1}{2}}\left(m\omega \frac{r^2}{\hbar}\right)$$

где $\exp(x) = e^x$ и

$$C_{n\ell} = \frac{\left[\frac{2^{n+\ell+2} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\ell+\frac{3}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{n-\ell}{2} \right]! \left[\frac{n+\ell}{1} \right]!}{\left[(n+\ell+1)! \right]^{\frac{1}{2}}}$$

А функции $L_a^b(r)$ — это обобщенные полиномы Лагерра, еще один тип полиномов, которые можно найти в справочниках и которые математики любезно разработали для решения задач подобной структуры:

$$L_a^b(r) = \frac{r^{-b} e^r}{a!} \frac{d^a}{dr^a} (e^{-r} r^{a+b})$$

Ух. Разве вы не рады, что не продирались через всю математику? Вот первые несколько обобщенных полиномов Лагерра:

$$\begin{aligned}
\gg L_0^b(r) &= 1 \\
\gg L_1^b(r) &= -r + b + 1 \\
\gg L_2^b(r) &= \frac{r^2}{2} - (b+2)r + \frac{(b+2)(b+1)}{2} \\
\gg L_3^b(r) &= \frac{r^3}{6} + \frac{(b+3)r^2}{2} - \frac{(b+2)(b+3)r}{2} + \frac{(b+1)(b+2)(b+3)}{6}
\end{aligned}$$

Хорошо, у вас есть полученное выражение для $R_{n\ell}(r)$. Чтобы найти полную волновую функцию $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)$, вы умножаете ее на сферические гармоники $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$:

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Теперь посмотрите на первые несколько волновых функций для изотропного гармонического осциллятора в сферических координатах:

$$\begin{aligned}
\gg \psi_{00m}(r, \theta, \phi) &= \frac{2}{\pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-m\omega \frac{r^2}{2\hbar}\right) Y_{0m}(\theta, \phi) \\
\gg \psi_{11m}(r, \theta, \phi) &= \frac{\left(\frac{5}{3}\right)^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{5}{4}} r \left(5 - \frac{2m\omega r^2}{\hbar} \right) \exp\left(-m\omega \frac{r^2}{2\hbar}\right) Y_{1m}(\theta, \phi) \\
\gg \psi_{20m}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{24^{\frac{1}{2}} \pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{4}} \left(15 - 20 \frac{m\omega r^2}{\hbar} - 4 \frac{m^2 \omega^2 r^4}{\hbar^2} \right) \exp\left(-m\omega \frac{r^2}{2\hbar}\right) Y_{0m}(\theta, \phi) \\
\gg \psi_{21m}(r, \theta, \phi) &= \pi^{\frac{3}{4}} \frac{3^{\frac{1}{2}}}{32} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{5}{4}} r \left(35 - 28 \frac{m\omega r^2}{\hbar} - 4 \frac{m^2 \omega^2 r^4}{\hbar^2} \right) \exp\left(-m\omega \frac{r^2}{2\hbar}\right) Y_{1m}(\theta, \phi)
\end{aligned}$$

Как видите, когда у вас есть потенциал, зависящий от r^2 , как в случае гармонических осцилляторов, волновая функция быстро становится чрезвычайно сложной.

К счастью, из всего этого получается кое-что относительно простое. Оказывается, энергия изотропного трехмерного гармонического осциллятора квантуется, и можно вывести следующее соотношение для энергетических уровней:

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

Таким образом, энергетические уровни начинаются с $3\hbar\omega/2$, затем идут $5\hbar\omega/2$, $7\hbar\omega/2$ и так далее.

Этот результат похож (хотя и не идентичен) на энергетические состояния, найденные для одномерных гармонических осцилляторов в главе 9.

В ЭТОЙ ГЛАВЕ...

- » Обзор ключевых событий, связанных с атомом
- » Использование уравнения Шрёдингера для расчетов водорода
- » Решение радиальных волновых функций
- » Вычисление степени энергетического вырождения водорода
- » В поисках неуловимого электрона

Глава 14

Простейший атом: Понимаем водород

Водород не только является самым распространенным элементом во Вселенной, но и самым простым с точки зрения атомной структуры — всего один протон и один электрон. И квантовая физика отлично справляется с предсказанием всех характеристик (таких как энергетические уровни и поведение) простых атомов. Эта глава полностью посвящена атому водорода и решению уравнения Шрёдингера для нахождения его энергии. Даже такой малыш, как атом водорода, может породить очень много математических выкладок — и в этой главе я помогу вам разобраться с такой математикой.

Использование уравнения Шрёдингера позволяет узнать практически все, что нужно знать об атоме водорода, и его применение основано на единственном предположении: волновая функция должна стремиться к нулю при стремлении r (расстояния от центра) к бесконечности. Это предположение делает возможным решение уравнения Шрёдингера. Я начинаю с представления уравнения Шрёдингера для атома водорода, а затем провожу вас через расчет вырождения энергетических уровней и определение того, насколько далеко электрон находится от протона.

Примечание: В этой главе вы исследуете волновую функцию для простого атома водорода. Это исследование включает уравнение Шрёдингера, которое разделяется на радиальную и угловую составляющие. Я подробно рассматриваю эти две составляющие в главе 13, поэтому убедитесь, что вы знакомы с этим материалом. Помимо обычной

работы, связанной с решением уравнения Шрёдингера — исчисления, линейной алгебры и дифференциальных уравнений — эта глава также включает суммирование и ряды. В этих случаях я пропускаю вычисления, но если вы любитель суммирования, то можете определенно проверить их самостоятельно.

Вспоминаем атомизм

Как я описываю в главе 2, идея атомов значительно предшествует квантовой физике. Однако ученые девятнадцатого века склонны были использовать эту идею как полезный инструмент для описания различных элементов. Они не обязательно верили в реальное существование атомов. Даже создатель периодической таблицы элементов Дмитрий Менделеев скептически относился к тому, что закономерности расположения элементов в его таблице означают реальное существование атомов.

Однако создание квантовой механики позволило науке, и особенно физике, непосредственно заняться вопросами об атоме. Я более подробно рассматриваю историю этих исследований в главе 3 и части 2 этой книги, но в этой главе я предлагаю вашему вниманию таблицу 14-1 с важнейшими вехами тех ранних лет.

ТАБЛИЦА 14-1

Ранние вехи в изучении атома

Дата	Кто	Что произошло
1905	Альберт Эйнштейн	Объяснил броуновское движение (впервые наблюдалшееся Робертом Брауном в 1827 году), используя статистический подход для описания движения атомов в жидкости. Это считается основным экспериментальным/теоретическим доказательством, убедившим ученых в существовании атомов.
1911	Эрнест Резерфорд	Создал модель атома с плотным ядром, вокруг которого вращаются электроны.
1913	Нильс Бор	Применил инструменты квантовой физики к модели атома Резерфорда. Квантуя энергетические состояния, он создал модель атома водорода Бора, которая соответствовала экспериментальным спектрам энергии.
1925	Вернер Гейзенберг Вольфганг Паули	Создал матричную форму квантовой механики (матричную механику). Помог Гейзенбергу согласовать матричную механику с энергетическими уровнями модели атома водорода Бора.

Дата	Кто	Что произошло
1926	Эрвин Шрёдингер Жан-Батист Перрен	Создал волновую форму квантовой механики (волновую механику) и показал, что она также предсказывает энергетические уровни модели атома водорода Бора. Получил Нобелевскую премию по физике за подтверждение объяснения Эйнштейном броуновского движения и за обширные исследования «прерывистой структуры материи», доказывающие существование атомов и молекул.
1932	Вернер Гейзенберг	Получил Нобелевскую премию по физике «за создание квантовой механики, применение которой привело, помимо прочего, к открытию аллотропных форм водорода».

Как видно из временной шкалы в таблице, исследование атомной структуры — и особенно структуры атома водорода — было ключевым в ранние дни и важным творческим моментом квантовой физики. Физики продолжили использовать инструменты квантовой физики для более глубокого изучения атомных структур, как в теоретических моделях, так и создавая основы для ускорителей частиц, позволяющих экспериментально исследовать эти структуры.

Переходим к сути: уравнение Шрёдингера для атома водорода

Что мы теперь знаем об атоме водорода? В своем базовом описании атом водорода состоит из одного протона, вокруг которого обращается один электрон. На рисунке 14-1 показана эта простая атомная структура.

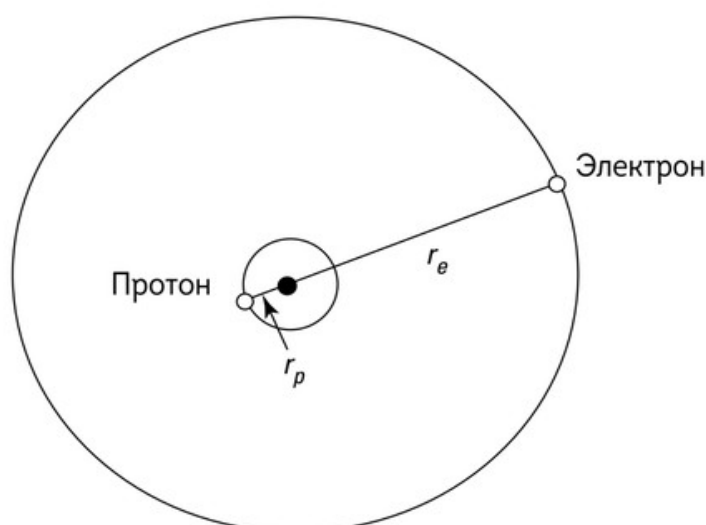


РИСУНОК 14-1.
Атом водорода.

Чтобы провести вас через процесс получения волнового уравнения, я использую шаги, представленные в главе 8 (но в этой главе вам придется вернуться и повторить некоторые шаги, взглянув на них под другими углами).

1. Определите координаты для записи уравнения Шрёдингера.



ЗАПОМНИ

Обратите внимание на рисунок 14-1: протон находится не точно в центре атома – точный центр обозначен черной точкой как центр масс. Фактически, протон находится на расстоянии r_p от точного центра, а электрон – на расстоянии r_e .

Чтобы получить необходимые волновые уравнения, нужно построить уравнение Шрёдингера, которое соответствует этой ситуации и включает члены для кинетической и потенциальной энергии протона и электрона. Вот эти члены:

- Для кинетической энергии протона:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2$$

где $\nabla_p^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_p^2}$. В этом выражении x_p – это x -координата протона, y_p – y -координата протона, z_p – его z -координата, а m_p – масса протона.

- Для кинетической энергии электрона:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2$$

где $\nabla_e^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_e^2}$. Этот член идентичен члену кинетической энергии протона, за исключением того, что все переменные относятся к электрону, а не к протону.

- Для потенциальной энергии:

Член для потенциальной энергии в уравнении Шрёдингера пока будет просто $V(\mathbf{r})$. Достаточно просто! Более конкретные ограничения на него я рассмотрю в шаге 2.

После определения этих трех терминов вы получаете стационарное уравнение Шрёдингера для данной ситуации:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2 \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) = E \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p)$$

где $\psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p)$ – волновая функция электрона и протона.

2. Применяем конкретные ограничения; упрощаем, где возможно.

Электростатическая потенциальная энергия $V(r)$ для центрального потенциала задается следующей формулой, где $\mathbf{r}$ – радиус-вектор, разделяющий два заряда:

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}|}$$



Для таких задач квантовые физики используют систему единиц СГС (сантиметр-грамм-секунда), где $1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$. Это еще один из тех хитрых приемов для упрощения вычислений. В этой системе потенциал, создаваемый зарядами электрона и протона в атоме водорода, равен:

$$V(r) = \frac{-e^2}{|\mathbf{r}|}$$

Заметим, что расстояние между электроном и протоном $\mathbf{r}$ можно записать как $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p$, поэтому предыдущее уравнение принимает вид:

$$V(r) = \frac{-e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|}$$

что дает следующий вариант уравнения Шрёдингера:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2 \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) - \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) = E \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p)$$

Итак, как же решать это уравнение? Узнаем об этом в следующем разделе.

Упрощение и разделение уравнения для атома водорода

Квантово-механическое уравнение Шрёдингера для атома водорода, полученное в предыдущем разделе, представляет собой довольно сложное выражение, что объясняет, почему эта задача была такой монструозной, когда физики впервые пытались с ней разобраться. Математика здесь запутанная, поскольку необходимо учитывать расстояние протона от центра масс атома. К счастью, следующие шаги помогут вам разобраться.

1. Преобразуйте уравнение Шрёдингера в разрешимую форму.

Вы могли бы подумать, что можно упростить задачу, просто предположив, что протон неподвижен и $\mathbf{r}_p = 0$. Это умный подход, но, к сожалению, протон действительно движется. В результате использование этого конкретного приема дает вам неточное уравнение.

1а. Перейдите к координатам центра масс, чтобы упростить обычное уравнение Шрёдингера.

Центр масс системы протон/электрон находится в точке:

$$\mathbf{R} = \frac{m_e \mathbf{r}_e + m_p \mathbf{r}_p}{m_e + m_p}$$

А вектор между электроном и протоном равен $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p$.

Использование векторов $\mathbf{R}$ и $\mathbf{r}$ вместо $\mathbf{r}_e$ и $\mathbf{r}_p$ делает уравнение Шрёдингера более простым для решения. Лапласиан для $\mathbf{R}$ это

$$\nabla_{\mathbf{R}}^2 = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}. \text{ А лапласиан для } \mathbf{r} \text{ это } \nabla_{\mathbf{r}}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Как связать $\nabla_{\mathbf{R}}^2$ и $\nabla_{\mathbf{r}}^2$ с обычными ∇_p^2 и ∇_e^2 в уравнении? После алгебраических преобразований получаем:

$$\frac{1}{m_e} \nabla_e^2 + \frac{1}{m_p} \nabla_p^2 = \frac{1}{M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{m} \nabla_{\mathbf{r}}^2$$

где $M = m_e + m_p$ – полная масса, а $m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$ называется *приведенной массой*. Когда вы соберете вместе уравнения для центра масс, вектора между протоном и электроном, полной массы и m , то стационарное уравнение Шрёдингера примет следующий вид:

стационарное уравнение Шрёдингера примет следующий вид:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_p} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

1б. Скорректируйте члены с потенциальной энергией в уравнении Шрёдингера.

С учетом векторов $\mathbf{R}$ и $\mathbf{r}$, потенциал задается как:

$$V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = V(r) = \frac{-e^2}{|\mathbf{r}|}$$

и уравнение Шрёдингера принимает вид:

$$\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

Это уравнение выглядит проще – основное улучшение в том, что теперь в знаменателе члена потенциальной энергии стоит $|\mathbf{r}|$ вместо $|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|$.

1с. Перепишите уравнение как разделяющееся дифференциальное уравнение.

Поскольку уравнение содержит члены, зависящие либо от $\mathbf{R}$, либо от $\mathbf{r}$, но не от обоих сразу, форма этого уравнения указывает на то, что это разделяющееся дифференциальное уравнение. Можно искать решение в следующем виде:

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r})$$

Подставляя предыдущее уравнение в уравнение из шага 1b, получаем:

$$\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \psi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r})$$

Может показаться, что решение уравнения выглядит сложнее, чем раньше. Однако, разделив это уравнение на $\psi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$, получаем:

$$\frac{-\hbar^2}{2M\psi(\mathbf{R})} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}) - \frac{\hbar^2}{2m\psi(\mathbf{r})} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} = E$$

что является уравнением с членами, зависящими либо от $\psi(\mathbf{R})$, либо от $\psi(\mathbf{r})$, но не от обоих. Вы можете разделить это уравнение на два уравнения (где полная энергия E равна $E_{\mathbf{R}} + E_{\mathbf{r}}$) и немного преобразовать их, чтобы получить:

- $\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}) = E_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R})$
- $\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \psi(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r})$

2. Решите дифференциальные уравнения для ψ .

Вы можете решить уравнения из шага 1с независимо друг от друга, что требует некоторой работы.

2a. Решение для $\psi(\mathbf{R})$.

В уравнении $\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}) = E_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R})$, как найти $\psi(\mathbf{R})$, которая является волновой функцией центра масс системы электрон/протон? Это простое дифференциальное уравнение, и его решение имеет вид:

$$\psi(\mathbf{R}) = C e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

В этом уравнении C – константа, а $\mathbf{k}$ – волновой вектор, где

$$|\mathbf{k}| = \frac{2M\sqrt{E_{\mathbf{R}}}}{\hbar^2}.$$



На практике $E_{\mathbf{R}}$ настолько мало, что люди почти всегда просто игнорируют $\psi(\mathbf{R})$ – то есть принимают ее равной 1. Другими словами, основное действие происходит в $\psi(\mathbf{r})$, а не в $\psi(\mathbf{R})$; $\psi(\mathbf{R})$ – это волновая функция для центра масс атома водорода, а $\psi(\mathbf{r})$ – волновая функция для (фиктивной) частицы массой m .

2b. Решение для $\psi(\mathbf{r})$.

$\psi(\mathbf{r})$ – это волновая функция для воображаемой частицы массой m . Вот уравнение Шрёдингера для $\psi(\mathbf{r})$:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \psi(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r})$$



ПОДСКАЗКА

На практике $m \approx m_e$, а $\psi(\mathbf{r})$ довольно близка к $\psi(\mathbf{r}_e)$, поэтому энергия E_r близка к энергии электрона. В шаге 1 этого раздела я упоминаю, что можно подумать, будто можно положить $r_p = 0$ и рассматривать протон как неподвижный центр атома водорода. Если попробовать это с исходным уравнением, получится уравнение, очень похожее на это уравнение Шрёдингера для $\psi(\mathbf{r})$. Но такое уравнение не было бы точным по двум причинам. Во-первых, вы бы использовали массу электрона m_e вместо приведенной массы m . Во-вторых, в нем отсутствовал бы небольшой вклад от $\psi(\mathbf{R})$.

Давайте найдем точное уравнение для $\psi(\mathbf{r})$, без упрощений. Решение $\psi(\mathbf{r})$ можно разделить на радиальную и угловую части (подробнее об этом разделении см. в главе 13):

$$\psi(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Угловая часть $\psi(\mathbf{r})$ состоит из сферических гармоник $Y_{lm}(\theta, \phi)$, так что с этой частью все в порядке. Теперь нужно решить уравнение для радиальной части $R_{nl}(r)$. Вот во что превращается уравнение Шрёдингера для радиальной части:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [rR_{nl}(r)] + \ell(\ell+1) \frac{\hbar^2}{2mr^2} rR_{nl}(r) - \frac{e^2}{r} rR_{nl}(r) = E_r rR_{nl}(r)$$

где $r = |\mathbf{r}|$.

Решение радиального уравнения Шрёдингера

Для решения конечного уравнения из предыдущего раздела рассмотрим два случая — когда r очень мало и когда r очень велико. Объединение этих случаев дает приближенную форму радиального решения.

Рассмотрение малых r

При малых r члены $-\frac{e^2}{r} rR_{nl}(r)$ и $E_r rR_{nl}(r)$ в предыдущем уравнении становятся намного меньше остальных, поэтому ими можно пренебречь и записать радиальное уравнение Шрёдингера в виде:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [rR_{nl}(r)] + \ell(\ell+1) \frac{\hbar^2}{2mr^2} rR_{nl}(r) = 0$$

Затем умножаем на $2m/\hbar^2$ и получаем:

$$-\frac{d^2}{dr^2} [rR_{nl}(r)] + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} rR_{nl}(r) = 0$$

Решение этого уравнения пропорционально $R_{n\ell}(r) \sim Ar^\ell + Br^{-\ell-1}$.

Однако заметим, что $R_{n\ell}(r)$ должно стремиться к нулю при $r \rightarrow 0$ — но член $r^{-\ell-1}$ стремится к бесконечности. Это означает, что B должно быть равно нулю, так что для малых r получаем следующее решение:

$$R_{n\ell}(r) \sim r^\ell$$

Рассмотрение больших r

Для очень больших r $\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \psi(r) - \frac{e^2}{|r|} \psi(r) = E_r \psi(r)$ становится

$$\frac{d^2}{dr^2} [r R_{n\ell}(r)] + \frac{2mE_r}{\hbar^2} r R_{n\ell}(r) = 0.$$

Поскольку электрон находится в связанном состоянии в атоме водорода, $E < 0$; следовательно, решение предыдущего уравнения пропорционально

$$R_{n\ell}(r) \sim Ae^{-\lambda r} + Be^{\lambda r}$$

где $\lambda = \frac{\sqrt{-2mE_r}}{\hbar}$.

Примечание: $R_{n\ell}(r) \sim Ae^{-\lambda r} + Be^{\lambda r}$ расходится при стремлении r к бесконечности из-за члена $Be^{\lambda r}$, поэтому B должно быть равно нулю. Это означает, что $R_{n\ell}(r) \sim e^{-\lambda r}$.

Рассмотрение обоих решений для r

Объединяя решения для малых r и больших r (из предыдущих разделов), уравнение Шрёдингера дает решение радиального уравнения Шрёдингера вида $R_{n\ell}(r) = r^\ell f(r) e^{-\lambda r}$, где $f(r)$ — некоторая пока неопределенная функция от r . Ваша следующая задача — определить $f(r)$, что делается путем подстановки этого уравнения в радиальное уравнение Шрёдингера, что дает следующее:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [r R_{n\ell}(r)] + \ell(\ell+1) \frac{\hbar^2}{2mr^2} r R_{n\ell}(r) - \frac{e^2}{r} r R_{n\ell}(r) = E_r r R_{n\ell}(r)$$

Выполнение подстановки приводит к следующему дифференциальному уравнению:

$$\frac{d^2}{dr^2} f(r) + 2 \left[\frac{\ell+1}{r} - \lambda \right] \frac{df(r)}{dr} + 2 \left[\frac{\frac{me^2}{\hbar^2} - \lambda(\ell+1)}{r} \right] f(r) = 0$$

Решение дифференциального уравнения

Предыдущий раздел оставил вам довольно сложное дифференциальное уравнение, не так ли? Его можно решить с помощью степенного ряда (что является распространенным способом решения дифференциальных уравнений). Используя правильную форму степенного ряда для $f(r)$ и пропуская две страницы вычислений, необходимых для упрощения ряда (всегда пожалуйста), вы получаете следующую функцию:

$$f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k = e^{2\lambda r}$$

Радиальная волновая функция $R_{n\ell}(r)$ выглядит следующим образом:

$$R_{n\ell}(r) = r^\ell f(r) e^{-\lambda r}$$

где, напомним, $\lambda = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$.

Подставляя имеющуюся форму $f(r) = e^{2\lambda r}$ в $R_{n\ell}(r)$, вы получаете следующее:

$$\begin{aligned} \gg R_{n\ell}(r) &= r^\ell f(r) e^{-\lambda r} \\ \gg R_{n\ell}(r) &= r^\ell e^{2\lambda r} e^{-\lambda r} \\ \gg R_{n\ell}(r) &= r^\ell e^{\lambda r} \end{aligned}$$

Вот как выглядит волновая функция $\psi(r)$: $\psi(r) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$. И подстановка вашей формулы $R_{n\ell}(r)$ из этого уравнения дает вам

$$\psi(r) = r^\ell e^{\lambda r} Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$



ВНИМАНИЕ

Это конечное уравнение выглядит нормально — *за исключением* того, что по мере увеличения показателя степени r значение всей функции будет расти еще быстрее! Волновая функция стремится к бесконечности при стремлении r к бесконечности. Но поскольку она представляет вероятность нахождения частицы, ожидается, что $\psi(r)$ должна стремиться к нулю при стремлении r к бесконечности. (Это предположение явно указано в начале главы.) Данная версия $R_{n\ell}(r) = r^\ell e^{\lambda r}$ очевидно нефизична. Другими словами, где-то была допущена ошибка. В следующем разделе вы узнаете, как исправить эту версию $f(r)$ и, в конечном итоге, $\psi(r)$.

Корректировка $f(r)$ для обеспечения конечности

Необходимо, чтобы решение радиального уравнения (из предыдущего раздела) стремилось к нулю при стремлении r к бесконечности, что означает корректировку $f(r)$ для обеспечения его конечности. Это приводит нас к одному из самых каверзных шагов.

1. Установите конечную границу для суммирования $f(r)$.

Проблема ухода $\psi(r)$ в бесконечность при стремлении r к бесконечности кроется в форме $f(r)$, которую мы предположили в предыдущем разделе:

$$f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k$$

Суммирование до бесконечности должно вас насторожить, и не без причины, поскольку нет оснований полагать, что атом водорода имеет бесконечно много состояний. Необходимо сохранить конечное число состояний.

Чтобы осуществить этот трюк, ряд должен обрываться на определенном индексе, который мы обозначим как N . N называется *радиальным квантовым числом*. Таким образом, выражение принимает следующий вид (обратите внимание, что суммирование теперь идет до N , а не до бесконечности):

$$f(r) = \sum_{k=0}^N a_k r^k$$

2. Установите равенство нулю констант после границы суммирования.

Чтобы этот ряд оборвался, все элементы после N должны равняться нулю. Это означает, что константы для этих членов (a_{N+1} , a_{N+2} , a_{N+3} и так далее) должны быть равны нулю. Такая ситуация возникает, когда выполняется следующее соотношение:

$$n\lambda - \frac{me^2}{\hbar^2} = 0 \quad n = 1, 2, 3...$$

В этом выражении n называется главным квантовым числом и вычисляется как $n = N + l + 1$. Ряд для $f(r)$ должен удовлетворять этому условию квантования, чтобы быть конечным. И теперь физически допустимы только n квантовых состояний.

И поскольку $\lambda = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$, уравнение

$$n\lambda - \frac{me^2}{\hbar^2} = 0 \quad n = 1, 2, 3...$$

также накладывает ограничения на допустимые значения энергии в атоме водорода.

Нахождение разрешенных энергий атома водорода

В предыдущем разделе вы обнаружили, что условие квантования для конечности $\psi(r)$ при стремлении r к бесконечности имеет вид:

$$n\lambda - \frac{me^2}{\hbar^2} = 0 \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

$$\text{где } \lambda = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}.$$

Подставляя λ в условие квантования и решая его относительно энергии E , получаем следующее (помня, что на каждом шаге n является квантовым числом, так что $n = 1, 2, 3 \dots$):

$$\begin{aligned} \frac{n\sqrt{-2mE}}{\hbar} - \frac{me^2}{\hbar^2} &= 0 \\ \frac{n\sqrt{-2mE}}{\hbar} &= \frac{me^2}{\hbar^2} \\ n^2 \frac{(-2mE)}{\hbar^2} &= \frac{m^2 e^4}{\hbar^4} \\ -n^2 2E &= \frac{me^4}{\hbar^2} \\ E &= \frac{-me^4}{2n^2 \hbar^2} \end{aligned}$$

Поскольку E зависит от главного квантового числа (см. предыдущий раздел), можно переобозначить энергию как E_n и явно указать значения квантового числа:

$$E_n = \frac{-me^4}{2n^2 \hbar^2} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$



ПОДСКАЗКА

Физики часто записывают этот результат через радиус Бора — орбитальный радиус, который Нильс Бор вычислил для электрона в атоме водорода, r_0 . Радиус Бора равен $r_0 = \hbar^2/me^2$.

И через r_0 энергия E_n выражается как:

$$E_n = \frac{-me^4}{2n^2 \hbar^2} = \frac{-e^2}{2r_0} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

Основное состояние, где $n = 1$, дает энергию примерно $E = -13.6$ эВ.

Заметьте, что эта энергия отрицательна, поскольку электрон находится в связанном состоянии — нужно добавить энергию электрону,

чтобы освободить его из атома водорода. Вот первое и второе возбужденные состояния:

- » Первое возбужденное состояние, $n = 2$: $E = -3.4$ эВ
- » Второе возбужденное состояние, $n = 3$: $E = -1.5$ эВ



ЗАПОМНИ

Как я описываю в главе 3, Нильс Бор использовал идею кванта для нахождения этих значений возбужденных состояний в 1911 году, более чем за десятилетие до появления математики квантовой механики, используемой в этой главе. Это достижение по праву принесло ему Нобелевскую премию по физике в 1922 году.

Построение формулы радиального решения

В этом разделе вы завершаете вычисление волновых функций, начатое в предыдущем разделе «Упрощение и разделение уравнения водорода», и обращаетесь к вычислению $R_{n\ell}(r)$ из раздела «Решение радиального уравнения Шрёдингера». Один из способов представить этот процесс вычисления заключается в том, что вы последовательно применяете ограничения, реструктурируете, решаете и проверяете граничные условия и нормировку, пока не получите окончательное решение.

1. Реструктурируйте уравнение радиальной волновой функции $R_{n\ell}(r)$.

Из предыдущих вычислений известно, что $R_{n\ell}(r) = r^\ell f(r) e^{-\lambda r}$, где $f(r) = \sum_{k=0}^N a_k r^k$, и, следовательно, $R_{n\ell}(r) = r^\ell e^{-\lambda r} \sum_{k=0}^N a_k r^k$.

Но нам предстоит еще работа. Предыдущее уравнение получено из решения радиального уравнения Шрёдингера:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} r R_{n\ell}(r) + \ell(\ell+1) \frac{\hbar^2}{2mr^2} r R_{n\ell}(r) - \frac{e^2}{r} r R_{n\ell}(r) = E_r r R_{n\ell}(r)$$

2. Добавьте мультипликативную константу $A_{n\ell}$ для соответствия этому решению.

Эта константа зависит от главного квантового числа n и квантового числа углового момента ℓ следующим образом:

$$R_{n\ell}(r) = A_{n\ell} r^\ell e^{-\lambda r} \sum_{k=0}^N a_k r^k$$

Значение $A_{n\ell}$ находится путем нормировки $R_{n\ell}(r)$.

3. Найдите $R_{nl}(r)$, выполнив математические вычисления.

Например, попробуем найти $R_{10}(r)$. В этом случае $n = 1$ и $l = 0$. Поскольку $N + l + 1 = n$, получаем $N = n - l - 1$. Таким образом, здесь $N = 0$. Это делает $R_{nl}(r)$ следующим:

$$R_{10}(r) = A_{10} r^0 e^{-\lambda r} \sum_{k=0}^0 a_k r^k$$

И сумма в этом уравнении равна $\sum_{k=0}^0 a_k r^k = a_0$, поэтому:

$$R_{10}(r) = A_{10} r^0 e^{-\lambda r} a_0$$

4. Преобразуйте уравнение $R_{10}(r)$ с помощью подстановок и ограничений.

Применяются следующие допущения и ограничения:

- Поскольку $r^0 = 1$, то $R_{10}(r) = A_{10} e^{-\lambda r} a_0$.
- Можно переписать $n\lambda - \frac{me^2}{\hbar^2} = 0$ (квантовое ограничение на эти физические решения) и $r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ (уравнение для радиуса Бора) как $\lambda = \frac{me^2}{n\hbar^2} = \frac{1}{nr_0}$.
- Также можно записать $R_{10}(r) = A_{10} e^{-\lambda r} a_0$ как:

$$R_{10}(r) = A_{10} a_0 \exp\left(\frac{-r}{nr_0}\right), \text{ где } r_0 - \text{радиус Бора.}$$

Примечание: Поскольку R_{nl} в данном случае является R_{10} , то $n = 1$ для этого уравнения, но я оставил n явно в предыдущем уравнении просто чтобы показать, как это выглядело бы в других энергетических состояниях.

5. Чтобы найти A_{10} и a_0 , нормализуйте волновую функцию $\psi_{100}(r, \theta, \phi)$ к 1.

Нормировка выполняется путем интегрирования $|\psi_{100}(r, \theta, \phi)|^2 d^3r$ по всему пространству и приравнивания результата к 1. Этот результат отражает идею о том, что вероятность существования данной волновой функции где-либо во Вселенной равна 1. (Подробнее об этой вероятности см. в главах 4 и 8.)



ЗАПОМНИ

К счастью, угловая часть волновой функции уже нормирована. Переопределив $d^3r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$ и проинтегрировав сферические гармоники, такие как Y_{00} , по полной сфере, $\int |Y_{00}|^2 \sin \theta d\theta d\phi$, получаем 1. (Вычисление и нормировку сферических гармоник можно найти в главе 13, если хотите проверить.)

6. Нормируем радиальную часть уравнения.

Подставляем $R_{10}(r)$, получаем:

$$1 = \int_0^{+\infty} r^2 |R_{10}(r)|^2 dr$$
$$1 = A_{10}^2 a_0^2 \int_0^{+\infty} r^2 \exp\left(\frac{-2r}{nr_0}\right) dr$$

В этом уравнении помните, что $n = 1$, и примените свои математические навыки для решения этих интегралов. В итоге вы получите следующее уравнение, содержащее только A_{10} и a_0 :

$$A_{10} a_0 = \frac{2}{\sqrt{r_0^3}}$$

7. Завершаем решение волновой функции окончательными подстановками.

Хотя получение предыдущего уравнения требует значительной работы, результат довольно прост, если учесть, что A_{10} нужен только для нормировки, а уравнение $R_{10}(r)$ содержит член $A_{10}a_0$ в начале. Именно это и показывает данное решение, поэтому можно просто подставить его в $R_{10}(r)$:

$$R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{r_0^3}} e^{\frac{-r}{r_0}}$$

Вы знаете, что $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$. В главе 13 приведены некоторые нормированные сферические гармоники $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$, включая

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Подставляя R_{10} и Y_{00} , получаем:

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{\sqrt{r_0^3}} e^{\frac{-r}{r_0}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

На этом завершается работа по нахождению волновой функции для одного из простейших квантовых состояний атома водорода.

Обобщенный случай для водорода

Как вы, несомненно, можете заметить из предыдущих разделов этой главы, нахождение волновой функции для атома водорода — сложная задача. И помните, это простейший из атомов! В общем случае волновая функция $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)$ для водорода выглядит следующим образом:

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = \frac{\sqrt{\left(\frac{2}{nr_0}\right)^3} \sqrt{(n-\ell-1)!}}{\sqrt{2n(n-1)!}} e^{\frac{-r}{nr_0}} \left(\frac{2r}{nr_0}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{nr_0}\right) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

где член $L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{nr_0}\right)$ называется *обобщенным полиномом Лагерра*.

Эти функции — решение дифференциального уравнения определенного типа (включая тот тип, который у вас здесь, к счастью). Вот первые несколько обобщенных полиномов Лагерра:

$$\begin{aligned} \gg L_0^b(r) &= 1 \\ \gg L_1^b(r) &= -r + b + 1 \\ \gg L_2^b(r) &= \frac{r^2}{2} - (b+2)r + \frac{(b+2)(b+1)}{2} \\ \gg L_3^b(r) &= -\frac{r^3}{6} + \frac{(b+3)r^2}{2} - \frac{(b+2)(b+3)r}{2} + \frac{(b+1)(b+2)(b+3)}{6} \end{aligned}$$

В предыдущих разделах главы (см. «Построение формы радиального решения»), вы обнаружили, что $\psi_{100}(r, \theta, \phi)$ выглядит так:

$$Y_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{\sqrt{r_0^3}} e^{\frac{-r}{r_0}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Вот некоторые другие волновые функции водорода, которые дают представление о том, насколько сложными они могут быть:

$$\begin{aligned} \gg \psi_{20m}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{2r_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2r_0}\right) e^{\frac{-r}{2r_0}} Y_{0m}(\theta, \phi) \\ \gg \psi_{21m}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{6r_0^3}} \frac{r}{2r_0} e^{\frac{-r}{2r_0}} Y_{1m}(\theta, \phi) \\ \gg \psi_{300}(r, \theta, \phi) &= \frac{2}{3\sqrt{3r_0^3}} e^{\frac{-r}{3r_0}} \left[1 - \left(\frac{2r}{3r_0}\right) + \left(\frac{2r^2}{27r_0^2}\right)\right] Y_{00}(\theta, \phi) \\ \gg \psi_{31m}(r, \theta, \phi) &= \frac{8}{9\sqrt{6r_0^3}} e^{\frac{-r}{3r_0}} \frac{r}{3r_0} \left[1 - \left(\frac{r}{6r_0}\right)\right] Y_{1m}(\theta, \phi) \\ \gg \psi_{32m}(r, \theta, \phi) &= \frac{4}{9\sqrt{30r_0^3}} \frac{r^2}{9r_0^2} e^{\frac{-r}{3r_0}} Y_{2m}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

Заметьте, что $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)$ ведет себя как r^ℓ при малых r и поэтому стремится к нулю. А при больших r функция $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)$ экспоненциально затухает до нуля. Таким образом, вы решили проблему из предыдущего раздела «Решение радиального уравнения Шрёдингера», где волновая функция расходилась при больших r . Модификация того ряда, чтобы $f(r)$ не становилась бесконечной, оказалась полезной. Неплохо.

Вы можете увидеть радиальные волновые функции $R_{10}(r)$, $R_{20}(r)$ и $R_{21}(r)$ на рисунке 14-2.

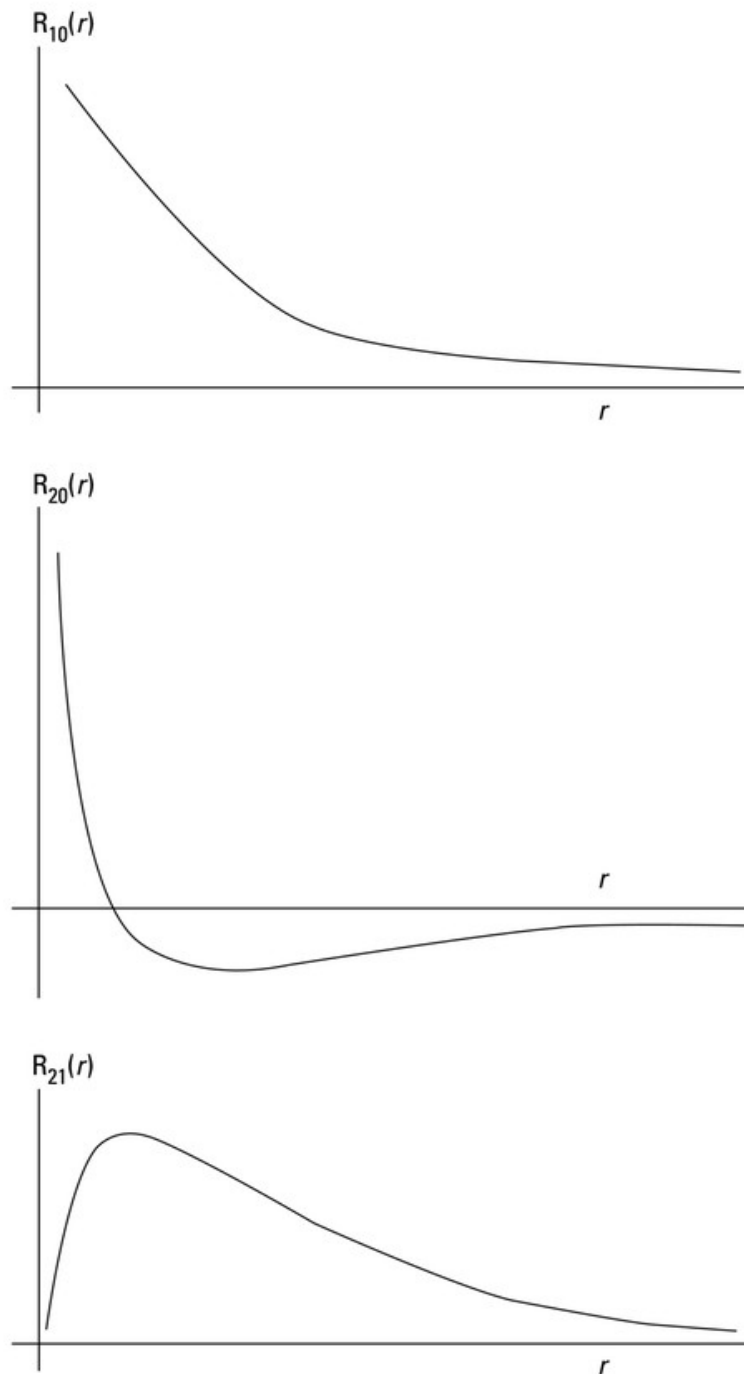


РИСУНОК 14-2.

Радиальные волновые функции $R_{10}(r)$, $R_{20}(r)$ и $R_{21}(r)$, сверху вниз.

Расчет энергетического вырождения

Каждое квантовое состояние атома водорода ($\psi_{n\ell m}[r, \theta, \phi]$) определяется тремя квантовыми числами: n (главное квантовое число), ℓ (квантовое число углового момента электрона) и m (проекция углового момента электрона на ось z). Возникает вопрос: сколько таких состояний имеют одинаковую энергию? Другими словами, каково энергетическое вырождение атома водорода в терминах квантовых чисел n , ℓ и m ?

Как было показано ранее в этой главе в разделе «Нахождение разрешенных энергий атома водорода», фактическая энергия зависит только от n :

$$E_n = \frac{-me^4}{2n^2\hbar^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Из этого уравнения видно, что E не зависит от ℓ и m . Так сколько же состояний $|n, \ell, m\rangle$ имеют одинаковую энергию для конкретного значения n ? Рассмотрим следующие условия:

- » Для конкретного значения n число ℓ может принимать значения от нуля до $n - 1$.
- » Для любого конкретного значения ℓ возможны значения m от $-\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \dots, \ell - 1, \ell$. Это означает, что для конкретного значения ℓ существует $(2\ell + 1)$ возможных состояний ℓ .
- » Для каждого значения n существует n^2 состояний, все из которых имеют один и тот же энергетический уровень.

Таким образом, кратность вырождения энергетических уровней атома водорода равна n^2 . Например, основное состояние при $n = 1$ имеет *кратность вырождения* $= n^2 = 1$. Это логично, поскольку для этого состояния ℓ , а следовательно, и m , могут быть равны только нулю.

При $n = 2$ вырождение равно 4. Это значение достаточно мало, чтобы легко рассмотреть все возможные случаи. У вас есть одно состояние с $\ell = 0$ и $m = 0$. Также есть состояние с $\ell = 1$, которое допускает три состояния, где $m = -1, m = 0$ и $m = 1$. Следующие волновые функции представляют эти четыре состояния, все из которых имеют одинаковые значения энергии:

- » $\psi_{200}(r, \theta, \phi)$
- » $\psi_{21-1}(r, \theta, \phi)$
- » $\psi_{210}(r, \theta, \phi)$
- » $\psi_{211}(r, \theta, \phi)$

Квантовые состояния: добавляем спин

Возможно, вы спрашиваете себя: «А как насчет спина электрона?» И правильно делаете! Спин электрона действительно создает дополнительные квантовые состояния. До сих пор в этом разделе мы рассматривали волновую функцию атома водорода как произведение радиальной и угловой частей:

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

Теперь можно добавить спиновую часть, соответствующую спину электрона, где s — спин электрона, а m_s — z -компонента спина:

$$\begin{aligned} &|s, m_s\rangle \\ \left| \begin{array}{l} \gg \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \gg \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{array} \right. \end{aligned}$$

Спиновая часть уравнения может принимать следующие значения:

Волновые функции для спиновых состояний

Когда учитывается спин, $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)$ становится $\psi_{n\ell m m_s}(r, \theta, \phi)$:

$$\psi_{n\ell m m_s}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)|s, m_s\rangle$$

И эта волновая функция может принимать две формы в зависимости от m_s :

$$\left| \begin{array}{l} \gg \psi_{n\ell m \frac{1}{2}}(r, s, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ \gg \psi_{n\ell m -\frac{1}{2}}(r, s, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \end{array} \right.$$

Влияние спина на вырождение

Как добавление спина к волновым функциям влияет на вырождение энергетических уровней? Если учитывать спин электрона, для каждого состояния $|n, \ell, m\rangle$ существует два спиновых состояния. Таким образом, с учетом спина электрона энергетическое вырождение атома водорода равно $2n^2$.

Фактически, можно даже добавить спин протона к волновой функции (хотя обычно этого не делают, поскольку спин протона лишь

слабо взаимодействует с магнитными полями, приложенными к атому водорода). В этом случае волновая функция выглядит следующим образом:

$$\psi_{n\ell m m_{se} m_{sp}}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi) |s_e, m_{se}\rangle |s_p, m_{sp}\rangle$$

где s_e — спин электрона, m_{se} — z-компонента спина электрона, s_p — спин протона, и m_{sp} — z-компонента спина протона. Спин электрона m_{se} имеет два состояния, вверх или вниз, так же как и спин протона m_{sp} .

Вы можете сложить эти два набора из двух независимых состояний. Вырождение при учете спина протона (а также электрона) приводит к множителю четыре для каждого $|n, \ell, m\rangle$. И теперь вырождение равно $4n^2$!

По линиям: получение орбиталей

При изучении нагретого водорода в спектроскопии получается спектр, состоящий из различных линий, называемых s (*sharp* — *острые*), p (*principal* — *главные*), d (*diffuse* — *диффузные*) и f (*fundamental* — *фундаментальные*). Присутствуют также другие, безымянные линии — g , h и так далее.

Оказывается, что линии s, p, d, f и остальные соответствуют различным состояниям углового момента электрона, называемым орбиталями. Состояние s соответствует $\ell = 0$; состояние p соответствует $\ell = 1$; состояние d соответствует $\ell = 2$; состояние f соответствует $\ell = 3$ и так далее. Каждое из этих состояний углового момента имеет различную форму электронного облака вокруг протона — то есть, различную орбиталь.

Три квантовых числа — n, ℓ и m — определяют орбитали. На рисунке 14-3 показаны электронные облака для состояния $|1,0,0\rangle$ ($1s$, с $m = 0$); состояния $|3,2,1\rangle$ ($4f$, с $m = 2$); и состояния $|2,1,1\rangle$ ($2p$, с $m = 1$).

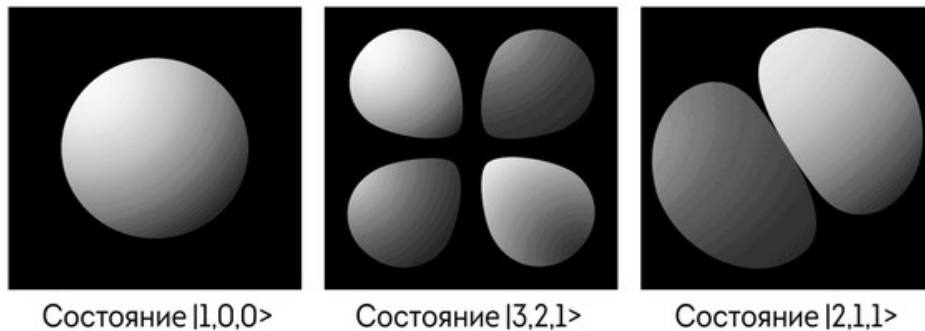


РИСУНОК 14-3.

Электронные облака для состояний $|1,0,0\rangle$, $|3,2,1\rangle$ и $|2,1,1\rangle$.

Охота за неуловимым электроном

Вы можете поинтересоваться, где находится электрон в атоме водорода в любой момент времени. Другими словами, на каком расстоянии электрон находится от протона? Чтобы это узнать, можно найти среднее значение r , то есть $\langle r \rangle$. Если волновая функция равна $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)$, то следующее выражение представляет вероятность того, что электрон будет обнаружен в элементе объема d^3r :

$$|\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)|^2 d^3r$$

В сферических координатах $d^3r = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$, поэтому можно записать $|\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)|^2 d^3r$ как:

$$|\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

Следовательно, вероятность того, что электрон находится в сферической оболочке от r до $r + dr$ равна:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} |\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi \, dr$$

И поскольку $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$, это выражение принимает вид:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} |R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 r^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi \, dr$$

Этот интеграл равен:

$$|R_{n\ell}(r)|^2 r^2 \, dr \int_0^{\pi} |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 \sin\theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

Сферические гармоники Y нормированы (см. главу 13), поэтому эти интегралы равны 1, и предыдущее уравнение просто становится:

$$|R_{n\ell}(r)|^2 r^2 \, dr$$

Это вероятность того, что электрон находится внутри сферической оболочки от r до $r + dr$.

Среднее значение r равно:

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 \, dr$$

что есть

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r^3 |R_{n\ell}(r)|^2 dr$$

Здесь все усложняется, поскольку $R_{n\ell}(r)$ включает полиномы Лагерра. Но после множества математических выкладок получается:

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r^3 |R_{n\ell}(r)|^2 dr = \left[3n^2 - \ell(\ell+1) \right] \frac{r_0}{2}$$

где r_0 — радиус Бора: $r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$. Радиус Бора составляет примерно 5.29×10^{-11} метров, поэтому среднее значение расстояния электрона от протона равно:

$$\langle r \rangle = \left[3n^2 - \ell(\ell+1) \right] (2,65 \times 10^{-11}) \text{ метров.}$$

Так, например, в состоянии $1s$ ($|1, 0, 0\rangle$), среднее значение r равно:

$$\langle r \rangle_{1s} = 3(2,65 \times 10^{-11}) = 7,95 \times 10^{-11} \text{ метров}$$

А в состоянии $4p$ ($|4, 1, m\rangle$):

$$\langle r \rangle_{4p} = 46(2,65 \times 10^{-11}) = 1,22 \times 10^{-9} \text{ метров.}$$

- » Рассмотрение многочастичных систем
- » Изучение систем с различными частицами
- » Возмущение гармонических осцилляторов и атомов водорода
- » Изучение теории рассеяния для столкновений частиц

Глава 15

Работа с множеством частиц и групповая динамика

Ранее в книге большинство глав, посвященных математическому аппарату квантовой физики (см. главы с 7 по 14), фокусировались на поведении одной частицы. И на это была веская причина: квантово-физические уравнения, описывающие множество частиц, очень быстро становятся сложными, и обычно настолько, что найти точное решение таких уравнений невозможно. Поскольку неразрешимая ситуация — не лучший способ понять, как что-то работает, в этой главе я сосредоточусь на задачах с простыми системами, для которых можно вычислить точное решение.

Если вы усвоили базовые концепции из предыдущих глав, вы можете углубиться в изучение более сложных систем. Даже не находя точных волновых функций, можно все равно узнать удивительно много о многочастичных системах. Например, вы можете вывести принцип запрета Паули, который говорит, помимо прочего, что никакие два электрона не могут находиться в абсолютно одинаковом квантовом состоянии. Однако многие многочастичные системы настолько сложны, что работа по описанию новой ситуации обычно требует сотрудничества команд исследователей в рамках крупных научных проектов и докторских диссертаций. Эта глава лишь поверхностно касается этих вопросов. (Если вы заинтересованы, то можете найти и решить более детальные задачи в книге «Рабочая тетрадь по квантовой физике для чайников» [Wiley].)

Эта глава начинается с введения в многочастичные системы, затем рассматривает тождественные частицы, симметрию (и антисимметрию) и электронные оболочки. Далее я помогу вам изучить теорию

возмущений, которая дает возможность объединять концепции из разных типов квантового поведения. И, наконец, я дам вам (математический) взгляд на работу ускорителей частиц, чтобы вы могли увидеть, как физики-ядерщики используют теорию рассеяния для описания результатов столкновений частиц.

Примечание: В этой главе вы будете применять математику, представленную в главах с 7 по 14, но фактически не будете решать никаких уравнений. Эта глава задумана как своего рода трамплин для любой работы с множественными частицами. Если вы чувствуете себя полностью уверенно с математикой из предыдущих глав и хотите глубже погрузиться в системы с множественными частицами, вам необходимо более глубокое понимание многомерного исчисления. И, возможно, стоит начать присматриваться к докторским программам на физическом факультете вашего местного университета.

Многочастичные системы

В главе 14 я рассматриваю основы квантово-физической математики атома водорода. Это простейший атом, поскольку водород включает только один протон и (по крайней мере в рассматриваемых версиях) один электрон. Тем не менее эти уравнения в главе 14 довольно сложны и требуют всех инструментов, рассмотренных в частях 3 и 4, чтобы их решить. Так что же происходит, когда у вас есть еще более сложная система с большим количеством частиц?

На рисунке 15-1 изображена многочастичная система, в которой частицы идентифицируются по их положениям в трехмерном пространстве (пока игнорируем спин). В этом разделе объясняется, как описать такую систему в терминах квантовой физики.

Рассмотрение волновых функций и гамильтонианов

Начнем с работы с волновой функцией. Состояние системы со многими *частицами* (см. рисунок 15-1) задается функцией $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots)$. А вот вероятность того, что частица 1 находится в $d^3\mathbf{r}_1$, частица 2 в $d^3\mathbf{r}_2$, частица 3 в $d^3\mathbf{r}_3$ и так далее:

$$|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_3 \dots$$

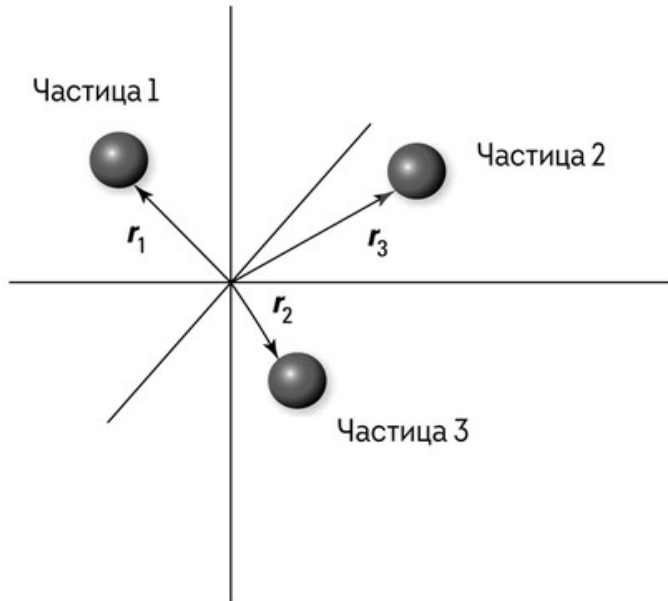


РИСУНОК 15-1:
Многочастичная система.

Нормировка $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots)$ требует, чтобы существовала вероятность того, что эти частицы существуют где-то, и интегрирование предыдущей функции по всему пространству должно давать вероятность 1. (См. главу 8 о нормировке.)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_3 \dots = 1$$

Что насчет оператора Гамильтона H , который дает вам энергетические состояния? Гамильтониан очень полезен в квантовой физике (как обсуждалось в главе 7). Что такое H , где $H\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots)$? Когда вы имеете дело с одной частицей, вы можете записать оператор Гамильтона как:

$$\frac{p^2}{2m}\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

Но в многочастичной системе гамильтониан должен представлять полную энергию всех частиц, а не только одной. Полная энергия системы является суммой энергий всех частиц (пока опуская спин), поэтому вот как можно обобщить гамильтониан для многочастичных систем:

$$H\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots)$$

Это, в свою очередь, равно следующему:

$$\begin{aligned} H\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) &= \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots) \end{aligned}$$

Здесь m_i — масса i -й частицы, а V — многочастичный потенциал. Опять же, по мере увеличения числа частиц этот гамильтониан становится все более громоздким. Учитывая это, потратить пару лет на изучение только одной многочастичной системы кажется вполне разумным сроком.

Нобелевская возможность: рассматриваем многоэлектронные атомы

В этом разделе мы кратко посмотрим на то, как волновая функция гамильтониана (см. предыдущий раздел) будет работать для нейтрального многоэлектронного атома (что является значительным усложнением по сравнению с рассмотренным в главе 14 более простым атомом водорода). Многоэлектронный атом, показанный на рисунке 15-2, является типичной многочастичной системой, рассматриваемой в квантовой физике. Здесь $\mathbf{R}$ — радиус-вектор ядра (относительно центра масс), $\mathbf{r}_1$ — радиус-вектор первого электрона (относительно центра масс), $\mathbf{r}_2$ — радиус-вектор второго электрона и так далее.

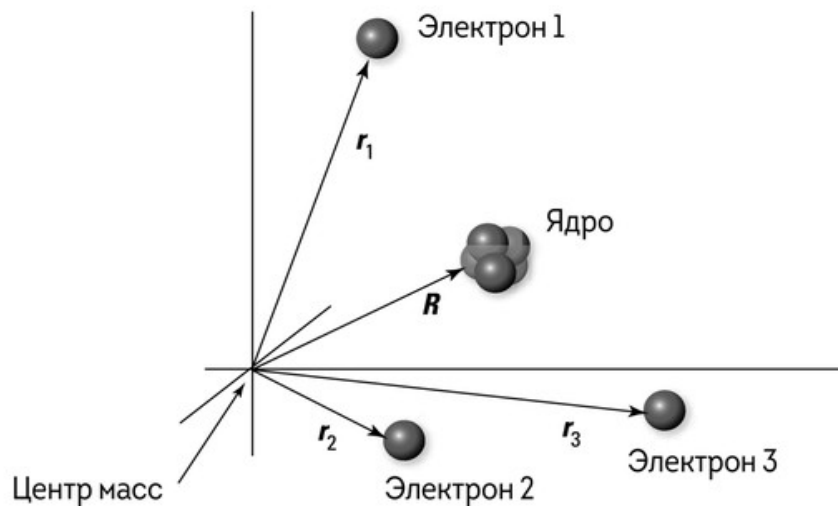


РИСУНОК 15-2.
Многоэлектронный атом.

Если у вас Z электронов, волновая функция выглядит как $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z, \mathbf{R})$, а кинетическая энергия электронов и ядра имеет следующий вид:

$$KE = \sum_{i=1}^Z \frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_z, R) - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_z, R)$$

А потенциальная энергия системы выглядит так:

$$PE = - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|r_i - R|} \psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_z, R) + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_z, R)$$

Итак, складывая два предыдущих уравнения, получаем следующее выражение для полной энергии ($E = KE + PE$) многочастичного атома:

$$\begin{aligned} E\psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_z, R) = & \sum_{i=1}^Z \frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_z, R) - \\ & - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_z, R) \\ & - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|r_i - R|} \psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_z, R) + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_z, R) \end{aligned}$$

Ну что ж, теперь это выглядит как настоящая неразбериха. Хотите получить Нобелевскую премию по физике? Просто найдите общее решение предыдущего уравнения. Когда у вас есть многочастичная система, в которой частицы взаимодействуют друг с другом, вы не можете разделить это уравнение на систему N независимых уравнений.



ЗАПОМНИ

В случаях, когда N частиц многочастичной системы не взаимодействуют друг с другом, уравнение Шрёдингера можно разделить на набор N независимых уравнений, и решения могут быть найдены. Но когда частицы взаимодействуют и уравнение Шрёдингера зависит от этих взаимодействий, его невозможно решить для сколько-нибудь значительного числа частиц.

Рассмотрим мощнейший инструмент: симметрия перестановок

Хотя найти общие решения для уравнений, подобных уравнению полной энергии многоэлектронного атома (из предыдущего раздела), невозможно, мы все же можем проследить, что происходит при обмене частиц местами — и результаты оказываются весьма показательными. В этом разделе рассматривается идея симметрии перестановок.

Порядок имеет значение: перестановка частиц с помощью оператора обмена

Можно определить, что происходит с волновой функцией при перестановке двух частиц. То, является ли волновая функция симметричной относительно таких операций, дает представление о том, могут ли две частицы находиться в одном и том же квантовом состоянии. В этом разделе обсуждается перестановка частиц и рассматриваются симметричные и антисимметричные функции.

Рассмотрим общий вид волновой функции для N частиц:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N)$$

СИММЕТРИИ ПОВСЮДУ

В этой главе я говорю о симметрии в терминах пространственной координаты r , чтобы упростить изложение, но можно также рассматривать и другие величины, такие как спин, скорость и так далее. Это не изменило бы сути обсуждения, поскольку все квантовые характеристики частицы – положение, скорость, импульс и так далее – можно объединить в единое квантовое состояние, которое обозначается ξ (греческая буква кси). В этом случае общая волновая функция для N частиц приняла бы вид: $\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N)$. Но для простоты в этом разделе мы рассматриваем волновую функцию $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N)$.

В физике симметрия представляет собой способы преобразования системы, которые не меняют лежащую в ее основе физическую реальность. В своей статье (More is Different), опубликованной в журнале Science (том 177, №4047) в 1972 году, американский физик-теоретик Филип У. Андерсон писал: «Под симметрией мы понимаем существование различных точек зрения, с которых система выглядит одинаково. Будет лишь не таким большим преувеличением сказать, что физика – это изучение симметрии». Значительная часть современной теоретической физики и физики элементарных частиц явно выражается через присутствующие и отсутствующие симметрии. Отсутствующие или нарушенные симметрии в физике называют «нарушенными» симметриями. Эти нарушенные симметрии могут иметь глубокие последствия, и несколько Нобелевских премий по физике были присуждены за анализ нарушенных симметрий.

Например, наша Вселенная, похоже, содержит гораздо больше *барионной материи* (технический термин для обычной материи), чем *антиматерии*. Если бы количество барионной материи и антиматерии было идеально сбалансировано при создании Вселенной, можно было бы ожидать, что эти противоположные виды материи аннигилировали бы друг друга, и никакой материи не осталось бы.

Причина, по которой этого не произошло, заключается в том, что в начальном распределении существовала *барионная асимметрия*, то есть во Вселенной было больше барионной материи, чем антиматерии – что привело к весьма важному следствию этой физической асимметрии!

Теперь представьте, что у вас есть оператор обмена P_{ij} , который меняет местами частицы i и j . Другими словами, это оператор, который берет член r_i и меняет его на член r_j . (Это буквально все, что делает этот оператор.) Используя оператор обмена, можно сразу определить два результата в этой ситуации:

- » Перестановка члена i с членом j идентична перестановке члена j с членом i , поэтому $P_{ij} = P_{ji}$.
- » Двукратное применение P_{ij} меняет два члена местами, а затем немедленно возвращает их обратно, поэтому P_{ij}^2 дает исходную функцию. Это означает, что $P_{ij}^2 = 1$.

Классификация симметричных и антисимметричных волновых функций

Поскольку $P_{ij}^2 = 1$ (см. предыдущий раздел), заметим, что если волновая функция является собственной функцией P_{ij} , то возможными собственными значениями являются 1 и -1 . То есть для $\psi(r_1, r_2, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_N)$, являющейся собственной функцией P_{ij} , это выглядит следующим образом:

Когда вы меняете местами частицы i и j , волновая функция либо остается той же самой, либо меняет знак на противоположный:

$$P_{ij}\psi(r_1, r_2, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_N) = \psi(r_1, r_2, \dots, r_j, \dots, r_i, \dots, r_N)$$

или

$$= -\psi(r_1, r_2, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_N)$$

Существует два типа собственных функций оператора обмена:

- » Симметричные собственные функции: $P_{ij}\psi_s(r_1, r_2, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_N) = \psi_s(r_1, r_2, \dots, r_j, \dots, r_i, \dots, r_N)$
- » Антисимметричные собственные функции: $P_{ij}\psi_a(r_1, r_2, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_N) = -\psi_a(r_1, r_2, \dots, r_j, \dots, r_i, \dots, r_N)$

Если волновая функция не соответствует одной из этих формул, то она не является собственной функцией оператора P_{ij} . (См. главу 7 для введения в собственные функции.) В ситуации, когда все частицы тождественны — как в атоме с несколькими электронами, — эта симметрия кажется довольно простой. Ситуация усложняется, когда частицы не тождественны.

Плавающие автомобили: решение систем многих различных частиц

В предыдущем разделе обсуждалась идея обмена одинаковых частиц; теперь рассмотрим системы частиц, которые можно различить, — то есть системы идентифицируемо разных частиц. Как вы увидите в этом разделе, такие системы можно разделить на линейно независимые уравнения.

Представьте, что у вас есть система из множества разных типов автомобилей, плавающих в пространстве. Вы можете различить все эти автомобили, потому что они разные — у них, например, разные массы.

Теперь предположим, что каждый автомобиль взаимодействует со своим собственным потенциалом — то есть потенциал, который видит любой автомобиль, не зависит от других автомобилей. Это означает, что потенциал для всех автомобилей — это просто сумма индивидуальных потенциалов, которые видит каждый автомобиль. Для N автомобилей это выглядит так:

$$PE = V(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sum_{i=1}^N V(r_i)$$

Возможность разделить потенциальную энергию на сумму независимых членов значительно упрощает задачу. Вот как выглядит гамильтониан:

$$H\psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V_i(r_i) \right] \psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$$

Это намного проще, чем гамильтониан для атома водорода, рассмотренный ранее в главе. Заметьте, что предыдущее уравнение для потенциала всех автомобилей можно разделить на N различных уравнений:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi_i(r_i) + V_i(r_i) \psi_i(r_i) = E_i \psi_i(r_i)$$

А полная энергия — это просто сумма энергий отдельных автомобилей:

$$E = \sum_{i=1}^N E_i$$

И волновая функция — это просто произведение индивидуальных волновых функций:

$$\Psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}(r_1, r_2, \dots, r_N) = \prod_{i=1}^N \Psi_{n_i}(r_i)$$

где символ $\prod$ подобен символу $\sum$, но обозначает произведение членов, а не сумму, и n_i относится ко всем квантовым числам i -й частицы.



ЗАПОМНИ

Когда частицы в системе различимы и подвержены независимым потенциалам, задача работы с множеством частиц упрощается. Вы можете разбить систему на N независимых одночастичных систем. Полная энергия — это просто сумма индивидуальных энергий каждой частицы. Уравнение Шрёдингера разбивается на N различных уравнений. А волновая функция оказывается просто произведением волновых функций N различных частиц.

Жонглирование множеством тождественных частиц

Когда в многочастичной системе все частицы неразличимы, начинается настоящее приключение. Если частицы неотличимы друг от друга, как определить, где какая находится? В этом разделе объясняется, что происходит в таких случаях.

Потеря индивидуальности

Представьте, что у вас есть набор шаров для пула (это такой вид бильярда, а не множество), и вы хотите рассмотреть их с точки зрения классической физики. Вы можете раскрасить каждый шар по-разному, и даже когда они будут носиться по бильярдному столу, вы сможете их различать — семерка в угловую лузу и тому подобное. В классической механике тождественные частицы сохраняют свою индивидуальность. Вы по-прежнему можете отличить их друг от друга.

В квантовой механике все иначе, поскольку невозможно определить положение частиц с абсолютной точностью. Поэтому, если у вас есть

группа электронов, вы быстро потеряете след, какой из них какой — их нельзя раскрасить, как бильярдные шары. Нет ничего такого, что позволило бы отличить один электрон от другого!

Например, посмотрите на ситуацию на рисунке 15-3, где изображено столкновение двух электронов с последующим их разлетом. В этом случае, казалось бы, легко отследить оба электрона.

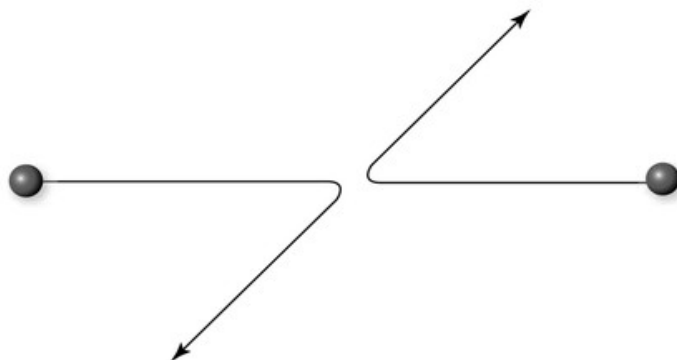


РИСУНОК 15-3.
Столкновение одного электрона с другим.

Но теперь посмотрите на ситуацию на рисунке 15-4. Те же два электрона могли отскочить так, как показано на этом рисунке, а не так, как показано на рисунке 15-3, — и вы никогда не узнали бы об этом.

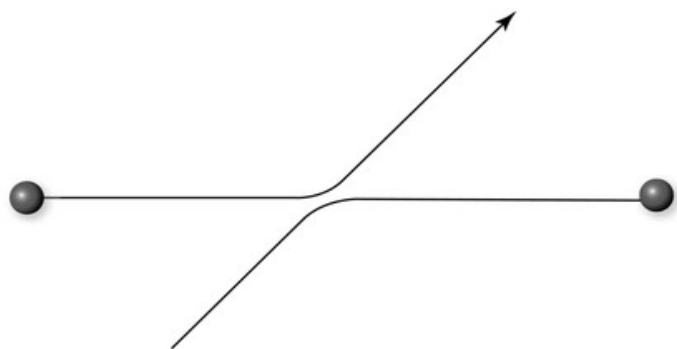


РИСУНОК 15-4.
Столкновение одного электрона с другим.

Так какой же электрон какой? С точки зрения экспериментатора, определить это невозможно. Вы можете установить детекторы для регистрации электронов, но не сможете определить, какой из входящих электронов попал в какой детектор, из-за двух возможных сценариев, показанных на рисунках 15-3 и 15-4.



ПОДСКАЗКА

С точки зрения квантовой механики, тождественные частицы не сохраняют свою индивидуальность в отношении каких-либо измеримых, наблюдаемых величин. Индивидуальность тождественных частиц теряется, как только вы смешиваете их с подобными части-

цами. Это утверждение верно для любой N-частичной системы. Как только вы позволяете N тождественным частицам взаимодействовать, становится невозможно сказать, какая именно частица находится в точке $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4$ и так далее.

Симметрия и антисимметрия

На практике потеря индивидуальности среди тождественных частиц означает, что плотность вероятности (вероятность того, что непрерывная случайная величина лежит в определенном диапазоне значений) остается неизменной при обмене частиц местами. Например, если бы вы поменяли местами электрон 10,281 с электроном 59,830, вероятность того, что электрон займет объем $d^3r_{10,281}$ и $d^3r_{59,830}$, осталась бы той же самой.



ЗАПОМНИ

Волновая функция системы N тождественных частиц должна быть либо симметричной, либо антисимметричной при обмене двух частиц местами. Решающим фактором оказывается спин:

- » Антисимметричная волновая функция: Если частицы имеют полуцелый спин ($1/2, 3/2$ и так далее), то волновая функция при обмене частиц местами выглядит так:
 - $\psi(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2, \dots, \mathbf{r}_js_j, \dots, \mathbf{r}_Ns_N) = -\psi(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2, \dots, \mathbf{r}_js_j, \dots, \mathbf{r}_Ns_N)$
- » Симметричная волновая функция: Если частицы имеют целый спин (0, 1 и так далее), то волновая функция при обмене частиц местами выглядит так:
 - $\psi(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2, \dots, \mathbf{r}_js_j, \dots, \mathbf{r}_Ns_N) = \psi(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2, \dots, \mathbf{r}_js_j, \dots, \mathbf{r}_Ns_N)$

Наличие симметричных или антисимметричных волновых функций приводит к различному физическому поведению.



ЗАПОМНИ

В частности, частицы с целым спином, такие как фотоны или пи-мезоны, называются бозонами. А частицы с полуцелым спином, такие как электроны, протоны и нейтроны, называются фермионами. Поведение систем фермионов сильно отличается от поведения систем бозонов.

И эти уравнения волновой функции оказываются основой *постулата симметризации*, который утверждает, что в системах из N идентичных частиц существуют только симметричные или антисимметричные состояния — состояния со смешанной симметрией не существуют.

Постулат симметризации также утверждает, что, как наблюдается в природе:

- » Фермионы имеют антисимметричные состояния при перестановке двух частиц.
- » Бозоны имеют симметричные состояния при перестановке двух частиц.

Главы 4 и 5 более подробно рассматривают фермионы и бозоны. В данном контексте ключевым моментом является то, что волновая функция N фермионов полностью антисимметрична, а волновая функция N бозонов полностью симметрична.

Обменное вырождение: Стационарный гамильтониан

Гамильтониан не меняется при перестановке двух идентичных частиц. Другими словами, гамильтониан инвариантен независимо от того, сколько идентичных частиц вы меняете местами. Это называется обменным вырождением.

Кстати, оператор обмена P_{ij} (представленный ранее в разделе «Порядок имеет значение: Перестановка частиц с помощью оператора обмена») является инвариантом движения, поскольку он коммутирует с гамильтонианом:

$$[H, P_{ij}] = 0$$

Построение симметричных и антисимметричных волновых функций

Многие волновые функции, являющиеся решениями физических задач, таких как прямоугольная потенциальная яма, изначально не являются симметричными или антисимметричными; они просто асимметричны. Другими словами, они не обладают определенной симметрией. Так как же получить симметричные или антисимметричные волновые функции?

Ответ в том, что вы должны создать их сами, и делается это путем сложения асимметричных волновых функций. Например, предположим, что у вас есть асимметричная волновая функция двух частиц, $\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2)$.



ПОДСКАЗКА

Чтобы создать симметричную волновую функцию, нужно сложить $\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2)$ и версию, где две частицы переставлены местами, $\psi(\mathbf{r}_2 s_2, \mathbf{r}_1 s_1)$. Предполагая, что $\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2)$ и $\psi(\mathbf{r}_2 s_2, \mathbf{r}_1 s_1)$ нормированы, вы можете создать симметричную волновую функцию, используя эти две волновые функции — просто сложив их:

$$\psi_s(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) + \psi(\mathbf{r}_2 s_2, \mathbf{r}_1 s_1)]$$



ПОДСКАЗКА

Антисимметричную волновую функцию можно получить, вычитая эти две волновые функции:

$$\psi_a(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) - \psi(\mathbf{r}_2 s_2, \mathbf{r}_1 s_1)]$$

Этот процесс быстро усложняется при добавлении большего числа частиц, поскольку вам нужно учитывать перестановки всех частиц. Например, если бы вы писали волновую функцию для трехчастичной системы, у вас было бы шесть различных волновых функций, которые нужно было бы складывать (для симметричной волновой функции) или складывать и вычитать (для антисимметричной волновой функции).

Теоретически вы можете создать симметричные и антисимметричные волновые функции для любой системы из N частиц, комбинируя волновые функции переставленных частиц. На практике создание таких волновых функций довольно быстро превращается в кошмар.

Работа с тождественными невзаимодействующими частицами

Работа с идентичными невзаимодействующими частицами упрощает задачу, поскольку вы можете рассматривать уравнения по отдельности, вместо того чтобы объединять их в одну большую путаницу. Предположим, у вас есть система из N идентичных частиц, каждая из которых находится в одном и том же потенциале. Вы можете разделить уравнение Шрёдингера на N идентичных одночастичных уравнений. Эта идея похожа на то, что я описываю в предыдущем разделе «Плавающие автомобили: решение систем многих различных частиц».

В том разделе вы рассматриваете волновую функцию системы из N различных частиц и получаете произведение всех индивидуальных волновых функций. Но это уравнение не работает с идентичными частицами, потому что:

- » Нельзя сказать, что частица 1 находится в состоянии $\psi_1(\mathbf{r}_1)$, частица 2 в состоянии $\psi_2(\mathbf{r}_2)$ и так далее – здесь мы имеем дело с идентичными частицами, а не с различными, как раньше.
- » У него нет внутренней симметрии – а системы из N идентичных частиц должны обладать определенной симметрией. Поэтому вместо простого перемножения волновых функций нужно действовать более аккуратно.

Волновые функции двухчастичных систем

Как создать симметричные и антисимметричные волновые функции для двухчастичной системы? Начнем с одночастичных волновых функций (см. предыдущий раздел «Построение симметричных и антисимметричных волновых функций»):

$$\begin{aligned} \gg \quad \psi_s(r_1 s_1, r_2 s_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(r_1 s_1, r_2 s_2) + \psi(r_2 s_2, r_1 s_1)] \\ \gg \quad \psi_a(r_1 s_1, r_2 s_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(r_1 s_1, r_2 s_2) - \psi(r_2 s_2, r_1 s_1)] \end{aligned}$$

По аналогии, вот симметричная волновая функция, составленная из двух одночастичных волновых функций:

$$\psi_s(r_1 s_1, r_2 s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(r_1 s_1) \psi_{n_2}(r_2 s_2) + \psi_{n_1}(r_2 s_2) \psi_{n_2}(r_1 s_1)]$$

А вот антисимметричная волновая функция, составленная из двух одночастичных волновых функций:

$$\psi_a(r_1 s_1, r_2 s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(r_1 s_1) \psi_{n_2}(r_2 s_2) - \psi_{n_1}(r_2 s_2) \psi_{n_2}(r_1 s_1)]$$

где n_i обозначает все квантовые числа i -й частицы.

Особо отметим, что $\psi_a(r_1 s_1, r_2 s_2) = 0$ при $n_1 = n_2$; другими словами, антисимметричная волновая функция обращается в нуль, когда две частицы имеют одинаковый набор квантовых чисел — то есть когда они находятся в одном квантовом состоянии. Эта идея имеет важные физические следствия (см. последующий раздел «Не всем вход разрешен: Принцип запрета Паули»).

Вот три других способа выражения волновой функции $\psi_s(r_1 s_1, r_2 s_2)$:

$\gg$ Где P — оператор перестановки (который выполняет перестановку своих аргументов), имеем:

$$\psi_s(r_1 s_1, r_2 s_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \sum_P P \psi_{n_1}(r_1 s_1) \psi_{n_2}(r_2 s_2)$$

$\gg$ Где член $(-1)^P$ равен 1 для четных перестановок (когда вы меняете местами $r_1 s_1$ с $r_2 s_2$, а также n_1 с n_2) и -1 для нечетных перестановок (когда вы меняете местами $r_1 s_1$ и $r_2 s_2$, но не n_1 и n_2 ; или меняете местами n_1 и n_2 , но не $r_1 s_1$ и $r_2 s_2$), имеем:

$$\psi_a(r_1 s_1, r_2 s_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \sum_P (-1)^P P \psi_{n_1}(r_1 s_1) \psi_{n_2}(r_2 s_2)$$

» В форме определителя имеем:

$$\Psi_a(r_1s_1, r_2s_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \det \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(r_1s_1) & \psi_{n_1}(r_2s_2) \\ \psi_{n_2}(r_1s_1) & \psi_{n_2}(r_2s_2) \end{vmatrix}$$

Заметим, что этот определитель равен нулю, если $n_1 = n_2$.

Волновые функции систем из трех и более частиц

Теперь мы можем построить волновую функцию системы из трех частиц из одночастичных волновых функций. Симметричная и антисимметричная волновые функции (соответственно) выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \Psi_s(r_1s_1, r_2s_2, r_3s_3) &= \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_P \Psi_{n_1}(r_1s_1) \Psi_{n_2}(r_2s_2) \Psi_{n_3}(r_3s_3) \\ \Psi_a(r_1s_1, r_2s_2, r_3s_3) &= \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_P (-1)^P \Psi_{n_1}(r_1s_1) \Psi_{n_2}(r_2s_2) \Psi_{n_3}(r_3s_3) \end{aligned}$$

Как обобщить это на системы из N частиц? Для системы из N частиц симметричная и антисимметричная волновые функции (соответственно) выглядят так:

$$\begin{aligned} \Psi_s(r_1s_1, r_2s_2, \dots, r_Ns_N) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \Psi_{n_1}(r_1s_1) \Psi_{n_2}(r_2s_2) \dots \Psi_{n_N}(r_Ns_N) \\ \Psi_a(r_1s_1, r_2s_2, \dots, r_Ns_N) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \Psi_{n_1}(r_1s_1) \Psi_{n_2}(r_2s_2) \dots \Psi_{n_N}(r_Ns_N) \end{aligned}$$



ЗАПОМНИ

Важно отметить, что антисимметричная волновая функция для N частиц обращается в ноль, если любые две частицы имеют одинаковые квантовые числа ($n_i = n_j, i \neq j$). И это оказывает большое влияние на физику, как мы увидим далее.

Не всем вход разрешен: Принцип запрета Паули

Антисимметричная волновая функция обращается в ноль, если любые две частицы в N -частичной системе имеют одинаковые квантовые числа. Поскольку фермионы — это тип частиц с антисимме-

тричными волновыми функциями, это эквивалентно утверждению, что в системе из N частиц никакие два фермиона не могут иметь одинаковые квантовые числа, то есть находиться в одном и том же состоянии.

Эта идея, впервые сформулированная австрийским физиком Вольфгангом Паули в 1925 году, получила название принципа запрета Паули. В то время физики обсуждали строение атома, и принцип Паули применялся к электронам (типу фермионов), которые присутствуют во всех атомах.



ЗАПОМНИ

Принцип запрета Паули гласит, что никакие два электрона не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии внутри одного атома. Этот результат имеет важное значение для структуры атомов. Вместо того чтобы беспорядочно накапливаться, электроны должны заполнять квантовые состояния, которые еще не заняты. Для бозонов это не так — например, если у вас есть куча альфа-частиц (бозонов), они все могут находиться в одном квантовом состоянии. Но не фермионы.

Электроны в атоме характеризуются различными квантовыми числами: n (энергия), l (угловой момент), m (z -компонента углового момента) и m_s (z -компонента спина). Используя эту информацию, можно построить электронную структуру атомов.

Разбираемся в периодической таблице

Одним из величайших успехов уравнения Шрёдингера вместе с принципом запрета Паули (см. предыдущий раздел) является объяснение электронной структуры атомов.



ЗАПОМНИ

Электроны в атоме имеют оболочечную структуру, где различные оболочки определяются определенными квантовыми числами. Электроны заполняют эту структуру в соответствии с принципом запрета Паули, который утверждает, что никакие два электрона не могут находиться в одном состоянии:

- » **Главные оболочки** определяются главным квантовым числом n , соответствующим расстоянию электрона от ядра.
- » **В свою очередь, оболочки имеют подоболочки**, основанные на квантовом числе орбитального углового момента ℓ .
- » **Каждая подоболочка имеет свои подоболочки** — называемые орбиталями — которые основаны на z -компоненте углового момента m .

Отмечаем структуру электронных оболочек

Таким образом, каждая оболочка n имеет $n - 1$ подоболочек, соответствующих $\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. В свою очередь, каждая подоболочка имеет $2\ell + 1$ орбиталей, соответствующих $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$.

Как и в случае с атомом водорода, различные подоболочки ($\ell = 0, 1, 2, 3, 4$ и так далее) называются s -, p -, d -, f -, g -, h -состояниями и так далее. Так, например, для данного n состояние s имеет одну орбиталь ($m = 0$), состояние p имеет три орбитали ($m = -1, 0$ и 1), состояние d имеет пять орбиталей ($m = -2, -1, 0, 1$ и 2), и так далее.

Кроме того, благодаря z -компоненте спина m_s каждая орбиталь может содержать два электрона — один со спином вверх и один со спином вниз.

Заполнение электронных оболочек

Как же электроны, будучи фермионами, заполняют структуру атома? Электроны не могут занять квантовое состояние, которое уже занято. Для атомов в основном состоянии электроны заполняют орбитали в порядке возрастания энергии. Как только все орбитали подоболочки заполнены, следующий электрон переходит на следующую подоболочку; а когда подоболочка заполнена, следующий электрон переходит на следующую оболочку, и так далее.

Конечно, по мере заполнения различных электронных оболочек, подоболочек и орбиталей, вы получаете разную электронную структуру. И поскольку взаимодействия между электронами составляют основу химии, то по мере того, как электроны заполняют последовательные квантовые уровни в различных атомах, вы получаете разные химические свойства этих атомов — которые определяют организацию периодической таблицы по периодам (строкам) и группам (столбцам).

Толкая систему: Теория возмущений

Задачи в квантовой физике могут становиться довольно сложными очень быстро — другими словами, к сожалению, для многих задач квантовой физики просто невозможно найти точные решения. Отсутствие точных решений особенно характерно при объединении двух типов систем. Например, вы можете знать все о том, как работают прямоугольные потенциальные ямы (см. главу 8) и все об электронах в магнитных полях (из классической физики; см. главу 2 об уравнениях Максвелла), но что происходит, если вы объедините эти две

системы (прямоугольные ямы и магнитные поля)? Волновые функции каждой системы, которые вы знаете точно, больше не применимы — вместо этого вам нужен какой-то гибрид. На помощь приходит теория возмущений! Эта теория позволяет работать со смешанными ситуациями, если только взаимодействие не слишком сильное.

Введение в теорию возмущений



ЗАПОМНИ

Идея *теории возмущений* заключается в том, что вы начинаете с известной системы — той, чьи волновые функции и энергетические уровни вам известны. До этого момента все определено. Затем появляется новый внешний стимул — возмущение, — нарушающий статус-кво. Например, вы можете приложить к известной системе электростатическое или магнитное поле, что несколько изменит эту систему.

Теория возмущений позволяет работать с такими ситуациями — если только возмущение не слишком сильное. Другими словами, если вы прикладываете слабое магнитное поле к известной системе, энергетические уровни останутся практически неизменными, но с некоторой поправкой. (*Примечание:* Именно поэтому это называется теорией возмущений, а не теорией радикального вмешательства.) Изменение, которое вы вносите в систему, достаточно мало, чтобы вы могли рассчитать результирующие энергетические уровни и волновые функции как поправки к фундаментальным энергетическим уровням и волновым функциям невозмущенной системы.

Так что же означает говорить о возмущениях в физических терминах? Допустим, у вас есть такой гамильтониан:

$$H = H_0 + \lambda W \quad (\lambda \ll 1)$$

Здесь H_0 — известный гамильтониан с известными собственными функциями и собственными значениями, а λW — так называемый возмущающий гамильтониан, где $\lambda \ll 1$ указывает на то, что возмущающий гамильтониан мал.

Нахождение собственных состояний гамильтониана в этом уравнении — вот что является сутью решения таких задач. Другими словами, вот задача, которую вы хотите решить:

$$H|\psi_n\rangle = (H_0 + \lambda W)|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (\lambda \ll 1)$$

Способ решения этого уравнения зависит от того, являются ли точные, известные решения H_0 вырожденными (то есть несколько состояний имеют одинаковую энергию) или невырожденными. В следующем разделе решается невырожденный случай.

Работа с возмущениями невырожденных гамильтонианов

Начнем со случая, когда невозмущенный гамильтониан H_0 имеет невырожденные решения. То есть для каждого состояния $|\phi_n\rangle$ существует ровно одна энергия E_n , которая не совпадает с энергией любого другого состояния: $H_0|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$ (подобно тому, как функция «один к одному» имеет только одно значение x для любого y). Эти невырожденные энергетические уровни невозмущенного гамильтониана обозначаются как $E^{(0)}$, чтобы отличать их от поправок, которые вносит возмущение, и уравнение приводится к виду:

$$H_0|\phi_n\rangle = E_n^{(0)}|\phi_n\rangle$$

Примечание: Далее я буду обозначать энергетические уровни возмущенной системы как E_n .

Идея теории возмущений заключается в том, что можно выполнить разложения по параметру λ (который намного меньше 1), чтобы найти волновые функции и энергетические уровни возмущенной системы. Вот уравнение, к которому это приводит, с учетом членов до λ^2 в разложениях:

$$E_n = E_0 + \lambda \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Это дает вам поправки первого и второго порядка к энергии согласно теории возмущений. Вы начинаете с невозмущенной энергии E_0 , модифицированной этими двумя энергетическими поправками.

Для сходимости этого уравнения член в сумме должен быть малым. Обратите особое внимание на то, что происходит с членом разложения, если энергетические уровни вырождены:

$$\frac{|\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$



ПОДСКАЗКА

Знаменатель здесь представляет собой разность энергий состояний. В случае вырождения $n = m$ вы получите $E_n^{(0)}$, равное $E_m^{(0)}$. Это приводит к нулевому знаменателю, поэтому уравнение поправок к энергии расходится (поскольку на ноль делить нельзя). Такой подход теории возмущений неприменим при наличии вырожденных энергий. Для систем с вырожденными энергетическими состояниями необходим

другой подход к теории возмущений (который будет рассмотрен далее в разделе «Работа с возмущениями вырожденных гамильтонианов»).

В следующем разделе я приведу пример, чтобы сделать идею возмущения невырожденных гамильтонианов более наглядной.

Теория возмущений в действии: гармонические осцилляторы в электрических полях

Рассмотрим случай, когда малая частица совершает колебания в гармоническом потенциале, двигаясь взад и вперед, как показано на рисунке 15-5.

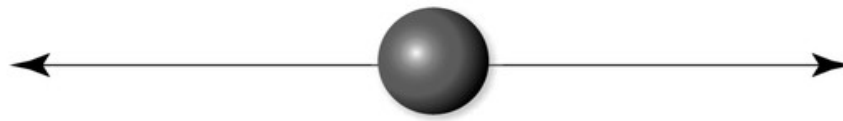


РИСУНОК 15-5.
Гармонический осциллятор.

Вот гамильтониан для этой частицы, где m — масса частицы, x — ее положение, а ω — угловая частота колебаний:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

Этот гамильтониан был подробно рассмотрен в главе 9, и вы можете обратиться к этому материалу, если хотите узнать, как использовать его для нахождения точных решений квантово-механических задач. С помощью теории возмущений вы можете взять это точное решение и использовать его как отправную точку для получения нового решения в ситуации с небольшими изменениями из-за возмущения.

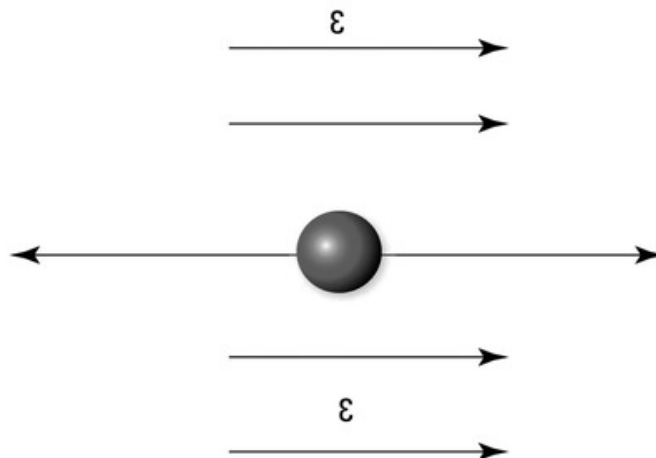


РИСУНОК 15-6:
Воздействие электрического поля на гармонический осциллятор.

Теперь предположим, что частица заряжена, имеет заряд q и что вы прикладываете слабое электрическое поле ε , как показано на рисунке 15-6.

В данном случае сила, обусловленная электрическим полем, является возмущением, и гамильтониан принимает вид:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + q \varepsilon x$$

Единственное отличие между работой в главе 9 и текущей работой заключается в последнем члене ($q \varepsilon x$), который представляет силу слабого электрического поля. При применении теории возмущений энергия гармонического осциллятора в электрическом поле оказывается равной:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega - \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

К счастью, в данном случае также возможно вычислить точный результат. Когда вы это делаете, то обнаруживаете, что энергия гармонического осциллятора в обоих случаях одинакова! Другими словами, теория возмущений дает тот же результат, что и точное решение.



ЗАПОМНИ

Однако не всегда можно вычислить точный результат, поэтому иногда приходится использовать теорию возмущений для нахождения решения. Такие примеры (для гармонического осциллятора) свидетельствуют о том, что теория возмущений как подход позволяет получить результат, совпадающий с точным решением (когда его можно вычислить).

Волновые функции заряженного осциллятора

Теперь рассмотрим волновую функцию для этого заряженного осциллятора (из примера предыдущего раздела). Вот волновая функция возмущенной системы в первом порядке:

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \lambda W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Преобразуя это уравнение и применяя такие параметры, как $\lambda W = q \varepsilon x$, можно привести уравнение к следующему виду:

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \frac{q \varepsilon}{\hbar \omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n} |n-1\rangle - \sqrt{n+1} |n+1\rangle \right)$$

Примечание: Это уравнение означает, что добавление электрического поля к квантовому гармоническому осциллятору приводит к расширению волновой функции гармонического осциллятора.

Изначально волновая функция гармонического осциллятора представляет собой стандартную волновую функцию гармонического осциллятора $|\psi_n\rangle = |n\rangle$. При приложении электрического поля происходит «размытие» волновой функции — добавляется компонента состояния $|n-1\rangle$, величина которой пропорциональна напряженности электрического поля ε и заряду осциллятора q , что выражается следующим образом:

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \frac{q\varepsilon}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n}|n-1\rangle - \dots)$$

Волновая функция также распространяется на другое соседнее состояние $|n+1\rangle$ следующим образом:

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \frac{q\varepsilon}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n}|n-1\rangle - \sqrt{n+1}|n+1\rangle)$$



ЗАПОМНИ

При внесении возмущения происходит смешивание состояний. Это смешивание означает, что вносимое возмущение должно быть малым по сравнению с разностью энергий невозмущенных состояний. В противном случае вся система может оказаться настолько «размытой», что будет невозможно делать какие-либо предсказания о ее поведении.

В любом случае, это хороший результат — смешивание состояний пропорционально силе приложенного электрического поля, и он типичен для теории возмущений.



ПОДСКАЗКА

Теория возмущений для невырожденных состояний работает и сильно зависит от того, насколько разделены энергетические состояния, чтобы решение могло их смешивать.

Работа с возмущениями вырожденных гамильтонианов

В предыдущем разделе «Работа с возмущениями невырожденных гамильтонианов» я показал, что когда имеются два эквивалентных энергетических состояния, поправка второго порядка к энергии не работает. Знаменатель этого члена становится равным нулю, что означает, что сам член становится бесконечным и нефизическим. Это означает, что для систем с вырожденными энергиями необходимо использовать другой подход.

Поскольку система является *вырожденной*, по определению, несколько состояний имеют одинаковую энергию. Предположим, что у вас есть система с f состояниями, имеющими одинаковую энергию (то есть система имеет f -кратное вырождение). Это приведет к следующему невозмущенному гамильтониану:

$$H_0 |\phi_{n_\alpha}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_{n_\alpha}\rangle \quad (\alpha = 1, 2, 3, \dots, f)$$

Как это влияет на картину возмущений? Полный гамильтониан H состоит из исходного невозмущенного гамильтониана H_0 и гамильтониана возмущения H_p :

$$H |\psi_n\rangle = (H_0 + H_p) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

В приближении нулевого порядка собственную функцию $|\psi_n\rangle$ можно записать как комбинацию вырожденных состояний:

$$|\psi_n\rangle = \sum_{\alpha=1}^f a_\alpha |\phi_{n_\alpha}\rangle \dots$$

Работа с этой волновой функцией утомительна и выходит за рамки этой книги. (В конце концов, конец уже близок!)



ПОДСКАЗКА

Вот один ключевой момент: поскольку в этих ситуациях имеются вырожденные энергетические состояния, несколько результатов будут давать идентичные энергетические решения. Другими словами, при работе с векторами и матрицами в вырожденных задачах такого типа вы обнаружите случаи, когда несколько элементов дают одинаковые энергетические выходы. Поэтому проблемы могут казаться совершенно неразрешимыми в один момент, а затем несколько элементов матрицы обращаются в ноль. В итоге вам может потребоваться выполнить всего пару вычислений для получения решений. Это происходит не всегда, но когда происходит — это определенно приятно.

Когда частицы сталкиваются: теория рассеяния

Многие поразительные открытия квантовой физики в течение двадцатого века были сделаны благодаря работе на ускорителях частиц, где физики могут разгонять частицы до огромных скоростей, а затем сталкивать их. Это увлекательная область науки, и когда эти частицы сталкиваются, анализ того, что получается в результате столкновения, дает много новой информации. Я обсуждаю многие связанные с этим

открытия в главах 4 и 5, но в этой главе я более глубоко погружаюсь в то, как физики делают эти открытия.

В классической физике можно точно предсказать угол, под которым сталкивающиеся объекты отскочат друг от друга при упругом столкновении (когда сохраняются импульс и кинетическая энергия). Однако в квантовой механике можно лишь определить вероятности углов рассеяния. И как в других случаях, рассмотренных в книге (например, в эксперименте с двумя щелями из главы 3), ситуации, дающие точные классические ответы, в квантовой физике дают только вероятности.

Знакомство с рассеянием частиц и сечениями

В квантовой физике полезно мыслить в терминах наблюдаемых величин — того, что можно измерить. Поэтому рассмотрим эксперимент по рассеянию с точки зрения входящих и исходящих частиц, как показано на рисунке 15-7. На рисунке поток частиц (падающие частицы) направляется слева и пересекает мишень. Большинство частиц проходит вправо без рассеяния, но некоторые взаимодействуют с мишенью и рассеиваются.

Частицы рассеиваются под определенным углом в трех измерениях — то есть угол рассеяния задается как телесный угол (изображенный на рисунке 15-7 в виде конуса), $d\Omega$, который равен $\sin\theta \, d\theta \, d\phi$, где ϕ и θ — сферические углы (подробнее о сферических углах см. в главе 13).

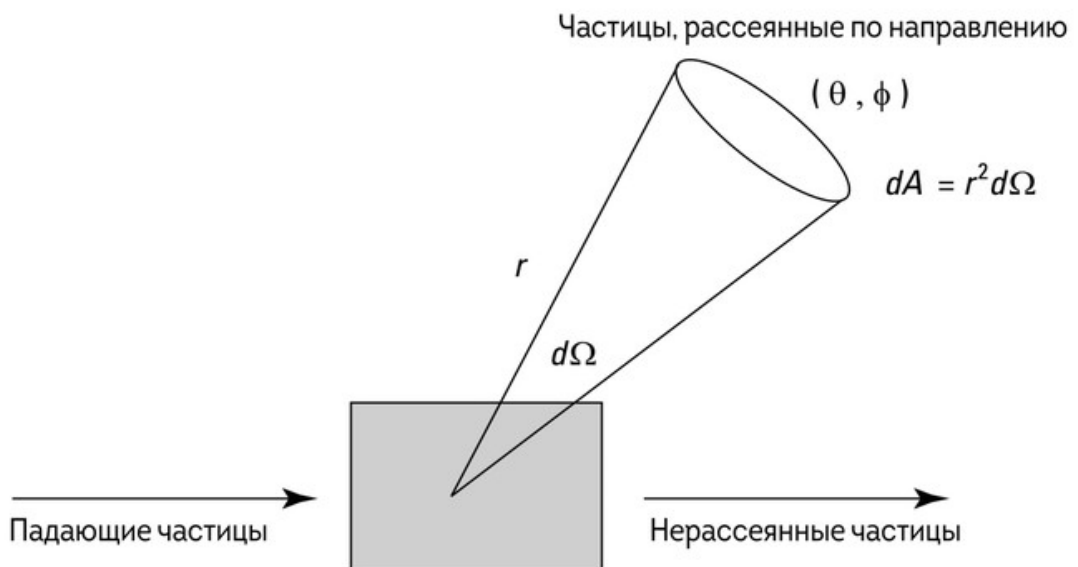


РИСУНОК 15-7.
Рассеяние на мишени.



ЗАПОМНИ

Дифференциальное сечение задается как $d\sigma(\phi, \theta)/d\Omega$ и представляет собой меру числа частиц в секунду, рассеянных в телесный угол $d\Omega$, на единицу падающего потока. Падающий поток J (также называемый плотностью тока) — это число падающих частиц на единицу площади в единицу времени. Таким образом,

$$\frac{d_\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = \frac{1}{J} \frac{dN(\phi, \theta)}{d\Omega}$$

где $N(\phi, \theta)$ — число частиц под углами ϕ и θ .



ПОДСКАЗКА

Дифференциальное сечение — это сечение рассеяния для конкретного телесного угла. Оно имеет размерность площади, деленной на стерadian (единица измерения телесного угла), поэтому термин «сечение» вполне уместен. Полное сечение σ — это сечение для рассеяния любого типа под любым углом. Таким образом, если дифференциальное сечение для рассеяния в определенный телесный угол подобно яблочку мишени, то полное сечение соответствует всей мишени целиком.

Полное сечение можно связать с дифференциальным сечением с помощью следующего интеграла:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma(\phi, \theta)d\Omega}{d\Omega} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \sin\theta d\theta d\phi$$

Преобразование между системой центра масс и лабораторной системой

Детальное рассмотрение рассеяния начинается с обсуждения системы центра масс и лабораторной системы отсчета. Эксперименты проводятся в лабораторной системе, но расчеты рассеяния выполняются в системе центра масс, поэтому необходимо уметь переводить

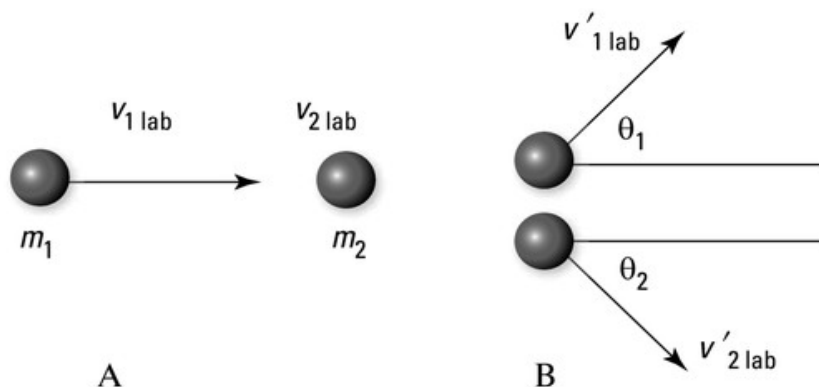


РИСУНОК 15-8:

Рассеяние в лабораторной системе отсчета.

результаты расчетов между этими системами отсчета. В этом разделе я не буду подробно рассматривать все преобразования, но изложу общий подход к их пониманию.

На рисунке 15-8 показано рассеяние в лабораторной системе отсчета. Одна частица, движущаяся со скоростью $v_{1\text{ lab}}$, падает на другую покоящуюся частицу ($v_{2\text{ lab}} = 0$) и сталкивается с ней. После столкновения первая частица рассеивается под углом θ_1 , двигаясь со скоростью $v_{1\text{ lab}}'$, а вторая частица рассеивается под углом θ_2 со скоростью $v_{2\text{ lab}}'$.



ПОДСКАЗКА

В системе центра масс центр масс неподвижен, а частицы движутся навстречу друг другу. После столкновения они разлетаются под углами θ и $\pi - \theta$. Для расчетов используется система центра масс, поскольку центр масс остается неподвижным, а это означает, что *полный импульс до и после столкновения в этой системе отсчета равен нулю*. Этот факт оказывается полезным при выполнении вычислений. (Всегда удобно, когда полный импульс равен нулю.)

Вы переходите туда и обратно между этими двумя системами отсчета — лабораторной системой и системой центра масс — чтобы выполнить преобразования. При этом необходимо связать скорости и углы (нерелятивистским способом). Вот некоторые исходные соотношения, полезные для связи углов θ_1 и θ :

1. Составьте уравнения для скорости.

Скорость частицы 1 в лабораторной системе отсчета равна скорости частицы 1 ($v_{1\text{ lab}}$) в системе центра масс (v_{1c}) плюс скорость самого центра масс (v_{cm}):

$$\text{До столкновения: } v_{1\text{ lab}} = v_{1c} + v_{cm}$$

$$\text{После столкновения: } v'_{1\text{ lab}} = v'_{1c} + v_{cm}$$

2. Используйте тот факт, что импульс равен нулю до и после столкновения.

$$\text{До столкновения: } m_1 v_{1c} + m_2 v_{2c} = 0$$

$$\text{После столкновения: } m_1 v'_{1c} + m_2 v'_{2c} = 0$$

Рассматривайте столкновение как упругое, так что кинетическая энергия сохраняется:

$$\frac{1}{2} m_1 v_{1c}^2 + \frac{1}{2} m_2 v_{2c}^2 = \frac{1}{2} m_1 v_{1c}'^2 + \frac{1}{2} m_2 v_{2c}'^2$$

Опираясь на эти исходные тождества и соотношения, а также знание тригонометрии, вы можете найти различные компоненты скорости

и выразить эти компоненты через углы и массы, удобным образом исключив скорость из рассмотрения. Если вы знаете массы частиц и углы вылета после столкновения, то сами значения скоростей вам фактически не важны.

Отслеживание амплитуды рассеяния бесспиновых частиц

В этом разделе мы рассмотрим упругое рассеяние двух бесспиновых нерелятивистских частиц с точки зрения квантовой физики в стационарном случае. Предположим, что взаимодействие между частицами зависит только от расстояния между ними, $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Задачи такого типа можно свести к двум независимым задачам (подробности см. в главе 14). Первое независимое уравнение рассматривает центр масс двух частиц как свободную частицу, а второе уравнение описывает эффек-

тивную частицу с массой $\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$.

Начиная с уравнения для эффективной массивной частицы

Первое независимое уравнение, описывающее свободное движение центра масс, не представляет интереса при рассмотрении рассеяния.

Следует сосредоточиться на втором уравнении, где $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ дает нам следующее уравнение Шрёдингера:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r)$$

Используя это уравнение, можно найти вероятность рассеяния частицы в телесный угол $d\Omega$ — эта вероятность определяется дифференциальным сечением, $d\sigma/d\Omega$.



ЗАПОМНИ

В квантовой физике частицы представлены волновыми пакетами. При рассеянии эти волновые пакеты должны быть достаточно широкими, чтобы их расплывание во время процесса рассеяния было пренебрежимо малым (однако волновой пакет не может быть настолько распределенным, чтобы охватывать всю лабораторию, включая детекторы частиц). Вот что важно: после рассеяния волновая функция разделяется на две части — нерассеянную и рассеянную. Именно так происходит рассеяние в квантовом мире.

Продолжаем рассмотрение рассеянной волновой функции

После рассеяния бесспиновых частиц нерассеянная волновая функция не представляет для нас особого интереса, в отличие от рассеянной волновой функции. Вот формы этих двух волновых функций:

- » Падающая волновая функция: $\phi_{\text{inc}}(r) = Ae^{ik_0 \cdot r}$, где $k_0^2 = \frac{2\mu E_0}{\hbar^2}$
- » Рассеянная волновая функция: $\psi_{\text{sc}}(r) = Af(\phi, \theta) \frac{e^{ik \cdot r}}{r}$

Для рассеянной волновой функции часть $f(\phi, \theta)$ называется амплитудой рассеяния. Говоря простым языком, амплитуда рассеяния представляет ту часть волны, которая будет рассеяна. При анализе задачи рассеяния вашей работой было бы найти ее. Здесь A — это нормировочный множитель и

$$k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$$

где E — энергия рассеянной частицы.



ПОДСКАЗКА

Амплитуда рассеяния бесспиновых частиц оказывается ключевой для понимания рассеяния с точки зрения квантовой физики. Задача определения дифференциального сечения сводится к определению амплитуды рассеяния!

Борновское приближение: спасая волновое уравнение

Чтобы найти амплитуду рассеяния — и, следовательно, дифференциальное сечение — бесспиновых частиц, нужно решить уравнение Шрёдингера:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r)$$

В итоге это приводит к следующей формуле (рассеянной волновой функции), которая, как вы можете догадаться, довольно сложна для точного решения:

$$\psi(r) = \phi_{\text{inc}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(r') \psi(r') d^3r'$$

Однако можно получить достаточно близкое решение с помощью последовательных приближений, называемых борновским приближением (это известный результат). В начале главы я упоминал, что физики могут получить докторскую степень, просто разработав метод решения одного квантового сценария. У Макса Борна уже была докторская степень, когда он разработал этот метод, но, учитывая, что он привлек Гейзенберга и некоторых других ключевых пионеров квантовой физики, он вполне заслужил, чтобы что-то было названо его именем! (Подробнее о Борне можно узнать в главах 3 и 16.)

Для начала, борновское приближение нулевого порядка — это просто $\psi_0(r) = \phi_{\text{inc}}(r)$. А подстановка этого члена нулевого порядка $\phi_{\text{inc}}(r)$ в волновую функцию рассеяния вместо $\psi(r')$ дает член первого порядка:

$$\psi_1(r) = \phi_{\text{inc}}(r) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{i|r-r_1|}}{|r-r_1|} V(r_1) \phi_{\text{inc}}(r_1) d^3r_1$$

Затем вы подставляете это приближение первого порядка в уравнение, чтобы получить приближение второго порядка:

$$\begin{aligned} \psi_2(r) = & \phi_{\text{inc}}(r) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r_2|}}{|r-r_2|} V(r_2) \phi_{\text{inc}}(r_2) d^3r_2 \\ & + \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4} \int \frac{e^{ik|r-r_2|}}{|r-r_2|} V(r_2) \psi_1(r_2) d^3r_2 \int \frac{e^{ik|r_2-r_1|}}{|r_2-r_1|} V(r_1) \phi_{\text{inc}}(r_1) d^3r_1 \end{aligned}$$

Эта кошмарная последовательность продолжается для членов высших порядков, которые можно найти, подставляя члены низших порядков в высшие. Но после того, как вы соберете борновское приближение волновой функции, у вас появится отправная точка для определения волновой функции, а затем вы сможете использовать ее для нахождения амплитуды рассеяния и дифференциального сечения.

5

**СРЕДИ
ДЕСЯТКОВ**

В ЭТОЙ ЧАСТИ...

Узнайте больше о десяти самых важных пионерах квантовой физики.

Узнайте больше о десяти крупнейших триумфах квантовой физики.

В ЭТОЙ ГЛАВЕ...

» Десять влиятельных ученых в области квантовой физики

» Вспоминаем ключевые достижения первопроходцев

» Запоминаем, где можно узнать больше о них

Глава 16

Десять важнейших пионеров квантовой физики

На протяжении всей этой книги я упоминаю нескольких наиболее инновационных и влиятельных мыслителей в истории науки, особенно тех, кто работал в области физики в начале двадцатого века. Эти ученые преобразовали наше понимание физической вселенной и самой фундаментальной природы материи и энергии — от классического взгляда к квантовому, описанному в этой книге.

В этой главе я уделяю время более подробному рассмотрению этих ученых. Я привожу некоторые биографические сведения и перечисляю их ключевые достижения. Некоторые из этих достижений рассматриваются в других частях книги, но в ряде случаев я также рассказываю о достижениях, выходящих за рамки тематики этой книги. Там, где это уместно, я предлагаю информацию об интересных и популярных биографиях этих ученых для читателей, которые хотели бы узнать больше.

Макс Планк (1858–1947)

Макс Карл Эрнст Людвиг Планк родился в Киле, Германия, в семье интеллектуалов. Во время учебы в университете в Берлине он занимался под руководством физиков Германа фон Гельмгольца и Густава Кирхгофа, работая над многими ключевыми проблемами термодинамики.

Самым значительным научным достижением Планка стало решение проблемы излучения абсолютно черного тела, подробно рассмотрен-

ное в главе 3, где он предложил идею квантования энергетических уровней. Этот подход задумывался как математическое упрощение для получения решения, а не как отражение реального физического ограничения в природе. Названная его именем физическая константа, постоянная Планка, встречается повсюду в квантовой физике. За эту работу он был удостоен Нобелевской премии по физике 1918 года.

Планк рано признал значимость специальной теории относительности Альберта Эйнштейна и стал горячим сторонником как самой теории, так и молодого физика, предложившего ее. Годы спустя и Планк, и Эйнштейн объединились в своем скептическом отношении к следствиям квантовой физики, особенно в том виде, в каком они проявлялись в копенгагенской интерпретации (которая объясняла квантовые измерения как коллапс квантовой волновой функции).

Для более полного знакомства с Максом Планком рекомендую прочитать его биографию, написанную Брэндоном Р. Брауном «Планк: Ведомый видением, сломленный войной» (Oxford University Press, 2015).

Альберт Эйнштейн (1879–1955)

Пытаться кратко подытожить жизнь и работу Альберта Эйнштейна кажется в некотором роде проявлением неуважения. Я считаю, что ни одна другая интеллектуальная фигура за всю историю не оказала столь глубокого, меняющего мир культурного влияния. В 1999 году журнал «Тайм» назвал Альберта Эйнштейна Человеком столетия.

Хотя он наиболее известен своей теорией относительности, Эйнштейн был ключевой фигурой в создании и развитии квантовой физики практически на каждом ее этапе. Даже имея за плечами три десятилетия опыта в физике, я, работая над этой книгой, постоянно удивлялся тому, как часто та или иная нить квантовой физики в конечном итоге приводила к самому Эйнштейну. Более полный список этих влияний вы можете найти в онлайн-ресурсах к этой книге (а именно, в шпаргалке к третьему изданию «Квантовая физика для чайников»).

Нильс Бор (1885–1962)

Нильс Бор родился в Копенгагене, Дания, и стал одной из центральных фигур в квантовой физике. Его главным достижением, за которое он получил Нобелевскую премию по физике 1922 года, было понимание того, что квантовую теорию можно применить к структуре атома.

Я рассматриваю это в главе 3. Теория взяла модель атома Резерфорда и применила квантовую теорию Планка, чтобы объяснить (с достаточной точностью) результаты спектроскопии атома водорода.

Отталкиваясь от этого первого успеха в квантовой теории, Бор стал горячим сторонником идеи внедрения квантовой физики. Он основал институт теоретической физики в Копенгагене, который стал известен как Копенгагенский институт. Практически каждый европейский физик той эпохи, работавший над квантовой теорией, в конечном итоге оказывался в Копенгагенском институте.

Хотя Бор, пожалуй, не был ведущим новатором ни в одном открытии (после создания своей модели атома), он оказал глубокое влияние на поколение физиков, которому предстояло превратить зарождающуюся квантовую теорию в полноценную математическую квантовую механику. Для следующего поколения он стал своего рода отеческой фигурой.

Луи де Бройль (1892–1987)

Луи Виктор Пьер Раймон, 7-й герцог де Бройль, родился в Дьеппе, Франция. Происходя из аристократической семьи, Луи начал свое образование с увлечения историей и предполагал, что будет развиваться именно в этом направлении. Однако в итоге он переключился на физику.

Несмотря на выдающуюся карьеру, наиболее известен он стал благодаря своей докторской диссертации 1924 года, в которой предсказал волновое поведение материи (об этом рассказывается в главе 3). Гипотеза де Бройля получила экспериментальное подтверждение в 1927 году и в конечном итоге принесла ему Нобелевскую премию по физике 1929 года.

Вернер Гейзенберг (1901–1976)

Вернер Карл Гейзенберг родился в Вюрцбурге, Бавария. Он учился физике как раз в то время, когда Нильс Бор находился на вершине славы — основывал Копенгагенский институт, получал Нобелевскую премию по физике и пытался убедить всех, что если только удастся разобраться в том, как работает квантовая теория, это произведет революцию в физике. Гейзенберг принял этот вызов.

После встречи с Бором в Копенгагене Гейзенберг разработал базовую структуру того, что впоследствии стало квантовой механикой. Он

отправил копию своей работы своему блестящему другу Вольфгангу Паули и своему наставнику Макс Борну. Через пару недель Борн представил результаты для публикации в физическом журнале и привлек другого студента, Паскуаля Йордана, чтобы помочь проработать детали.

В течение нескольких месяцев 1925 года Гейзенберг, Борн и Йордан разработали матричную формулировку квантовой механики, представив теорию в точных математических терминах как таблицы чисел, взаимодействующих друг с другом. В 1927 году Гейзенберг опубликовал принцип неопределенности, носящий его имя; это один из самых фундаментальных концептов квантовой физики. Когда в 1932 году присуждалась Нобелевская премия по физике за развитие квантовой механики, ее получил один Гейзенберг.

Хотя это и не биография, жизнь Гейзенберга находится в центре физического повествования книги Карло Ровелли «Гельголанд: Осмысление квантовой революции» (Riverhead Books, 2021). Другой удачный нарративный подход к личности Гейзенберга представлен в пьесе Майкла Фрейна «Копенгаген» (1998), основанной на реальной поездке Гейзенберга в Копенгаген в 1941 году для встречи с Нильсом Бором. У них состоялась личная беседа, но ни один из них никогда не раскрыл подробностей того разговора.

Эрвин Шрёдингер (1887–1961)

Эрвин Рудольф Йозеф Александр Шрёдингер родился в Вене, Австро-Венгрия. Примерно в то же время, когда Гейзенберг, Борн и Йордан разрабатывали свою матричную формулировку квантовой механики, Шрёдингер развивал волновую механику. Он также вывел то, что стало известно как уравнение Шрёдингера. За разработку этого уравнения он получил Нобелевскую премию по физике 1933 года, которую поделил с Полем Дираком.

Имя Шрёдингера, вероятно, наиболее известно как в физике, так и за ее пределами благодаря мысленному эксперименту, названному «кот Шрёдингера», который призван указать на абсурдность копенгагенской интерпретации квантовой механики. Этот мысленный эксперимент подробно рассматривается в главе 6.

Поль Дирак (1902–1984)

Поль Адриен Морис Дирак родился в Бристоле, Англия. В то время как Гейзенберг, Борн и Йордан создавали матричную механику, а Шрёдингер разрабатывал волновую механику, Поль Дирак *также*

выводил математические основы квантовой механики. Его метод совпадал с подходом тех, кто развивал матричную механику, хотя он использовал еще более эзотерический математический аппарат.

В 1930 году Дирак опубликовал книгу «Принципы квантовой механики», которая ввела многие математические инструменты, используемые для исследования квантовой механики по сей день, такие как обозначения Дирака (или бра-кет нотация, как обсуждается в главе 7). Он также работал над согласованием специальной теории относительности Эйнштейна с уравнениями квантовой механики, и в процессе этой работы предсказал существование антиматерии, которая была экспериментально обнаружена в 1932 году. За эту работу Дирак разделил Нобелевскую премию по физике 1933 года с Эрвином Шрёдингером.

Макс Борн (1882–1970)

Макс Борн родился в Бреслау, который сейчас известен как Вроцлав, Польша. Борн был непосредственным наставником целого ряда революционных физиков, которые помогли создать квантовую механику. Когда Гейзенберг работал над своей формулировкой, именно Борн направил его к осмыслению квантовых наблюдаемых величин в матричном формате. И в конечном итоге именно Борн осознал, что волновую функцию Шрёдингера можно понимать как представление вероятности определенного исхода. Это важнейшее прозрение привело к присуждению ему Нобелевской премии по физике в 1954 году.

Ричард Фейнман (1918–1988)

Ричард Филлипс Фейнман родился в Куинсе, Нью-Йорк, США. Фейнман получил степень бакалавра по физике в Массачусетском технологическом институте, а затем продолжил обучение в Принстонском университете, где получил докторскую степень. В своей диссертации 1942 года он заложил основы некоторых фундаментальных идей, к которым впоследствии вернулся в своих исследованиях, включая:

- » Формулировку интеграла по путям
- » Диаграммы Фейнмана
- » Представление позитронов как электронов, движущихся назад во времени

Когда в 1965 году присуждалась Нобелевская премия по физике за развитие квантовой электродинамики, ее разделили Фейнман, Джулиан Швингер и Синъитиро Томонага, и к тому моменту этим ключевым достижениям Фейнмана было уже более 20 лет. Тем не менее он по праву гордился ими, и даже знаменито украсил свой фургон диаграммами Фейнмана.

Фейнман написал несколько книг. Большинство из них посвящены физике и представляют собой, по сути, расшифровки его лекций, хотя пара книг носит более автобиографический характер, а именно «Вы, конечно, шутите, мистер Фейнман: Приключения любознательного характера» и «Какое тебе дело до того, что думают другие? Дальнейшие приключения любознательного характера» (обе изданы W.W. Norton & Company, 2018). Для полной биографии стоит обратиться к книге Джеймса Глейка «Гений: Жизнь и наука Ричарда Фейнмана» (Pantheon, 1992).

Мюррей Гелл-Манн (1929–2019)

Мюррей Гелл-Манн родился на Манхэттене, Нью-Йорк, США. Если Фейнман был одним из последних физиков, получивших докторскую степень до создания ядерной бомбы, то Гелл-Манн, получивший степень бакалавра в 1948 году, принадлежал к первому поколению физиков ядерной эпохи. В 1950-х годах он вместе с Фейнманом работал над открытием некоторых фундаментальных аспектов слабого взаимодействия частиц.

Гелл-Манн наиболее известен как основатель квантовой хромодинамики (КХД), и в частности тем, что ввел термин «кварк» для обозначения новых частиц, составляющих адроны (субатомные частицы), такие как протон и нейтрон. (Этот термин был отсылкой к строке из романа Джеймса Джойса «Поминки по Финнегану».) Его исследования фундаментальной природы физики частиц принесли Гелл-Манну Нобелевскую премию по физике 1969 года.

В ЭТОЙ ГЛАВЕ...

- » Объяснение неожиданных результатов
- » Определение характеристик квантового мира
- » Разработка новых моделей

Глава 17

Десять триумфов квантовой физики

Квантовая физика была создана для объяснения физических явлений, которые не могла объяснить классическая физика. В этой главе рассматриваются десять триумфов квантовой физики и подчеркиваются ключевые моменты, которые делают каждое из этих достижений столь значимым. Более подробную информацию о связанных концепциях можно найти во всей книге, особенно в частях 1 и 2.

Корпускулярно-волновой дуализм

Является ли частица волной? Или волна — частицей? Это один из вопросов, для решения которого была создана квантовая физика, поскольку в лабораторных условиях частицы проявляли волновые свойства, а волны демонстрировали свойства частиц. Ключевые моменты в истории развития представлений о корпускулярно-волновом дуализме освещаются на протяжении всей книги, особенно в главах 2, 3 и 4.

Фотоэффект

Одним из первых успехов квантовой физики стало объяснение фотоэлектрического эффекта, о котором говорится в главе 3. Энергия электронов возрастает с увеличением частоты света, а не его интен-

сивности — ситуация, которая подтверждает теорию о том, что свет представляет собой поток дискретных фотонов. Альберт Эйнштейн объяснил это явление в 1905 году и в итоге получил за это объяснение Нобелевскую премию по физике 1921 года. Фотоэлектрический эффект имеет множество практических применений, в том числе в области получения изображений и детектирования света. Можно создать материал, который испускает различное количество электронов при изменении освещения, создавая датчик, способный обнаруживать изменения света или изображения. Если вам когда-либо приходилось подходить к магазину и входная дверь открывалась перед вами автоматически, то эта технология берет свое начало именно в фотоэлектрическом эффекте. Солнечные панели — еще одна важная технология, которая является наследием этого открытия.

Постулирование спина

Результаты эксперимента Штерна-Герлаха невозможно было объяснить без постулирования спина — еще одного триумфа квантовой физики. В этом эксперименте электроны пропускались через магнитное поле, и согласно классическим предсказаниям, поток электронов должен был создавать одно пятно электронов на экране. Однако наблюдались два пятна, которые соответствовали двум состояниям спина — вверх и вниз.

Это детальное понимание поведения и структуры электрона, а также частиц в целом, привело к более глубокому изучению фундаментальной природы физической материи и ее структуры. Стандартная модель физики частиц — современная теория, описывающая базовые строительные блоки вселенной — включает в себя спин как фундаментальное свойство при определении всех частиц во вселенной.

Отличия между законами Ньютона и квантовой физики

Пожалуй, величайшим триумфом квантовой физики стало создание за полвека всеобъемлющей (и точной!) теоретической и математической базы, которая предложила альтернативу классической физике для анализа материи и энергии в квантовом мире. В классической физике связанные частицы могут иметь любую энергию или скорость, но в квантовой физике это не так. В классической физике можно точно определить и положение, и импульс частиц, что невозможно в квантовой физике (благодаря принципу неопределенности Гейзенберга,

о котором я рассказываю в главе 3). А в квантовой физике можно накладывать состояния друг на друга и наблюдать, как частицы проникают в области, в которые с классической точки зрения невозможно.

Принцип неопределенности Гейзенберга

В своем принципе неопределенности Гейзенберг теоретически обосновал, что невозможно одновременно точно измерить положение и импульс частицы. Это одна из центральных теорий, которая преобразила классическую физику и заложила основу квантовой физики. (Подробнее об этом в главе 3.)

Квантовое туннелирование

Пожалуй, один из самых странных результатов квантовой физики проявляется, когда частица преодолевает барьер, который она (с классической точки зрения) преодолеть не должна. Например, как может электрон с энергией E проникнуть в электростатическое поле (пример потенциальных барьеров, о которых говорится в главе 8), для преодоления которого требуется энергия больше E ? В классической физике ответ прост: никак.

Квантовая физика показывает, что в некоторых случаях частица может оказаться по другую сторону этого «непреодолимого» барьера. В процессе, называемом *квантовым туннелированием*, частица фактически пролезает под барьером, не проходя промежуточное расстояние. Волновая функция крайне мала внутри барьера, внутри электростатического поля. Поскольку квадрат модуля волновой функции представляет вероятность обнаружения частицы в данном месте, это означает, что вероятность найти частицу внутри электростатического поля чрезвычайно мала. Шанс обнаружить частицу внутри электростатического поля ничтожен.

Однако волновая функция по другую сторону барьера от начального положения частицы на самом деле довольно значительна по сравнению с ее значением внутри барьера. (Подтверждение этому можно найти в главе 8.) Другими словами, вопреки всякой классической интуиции, существует значительная вероятность того, что частица окажется по другую сторону барьера. В таких случаях частица каким-то образом перемещается с одной стороны этого предположительно непреодолимого барьера на другую, хотя вы практически никогда не обнаружите ее внутри барьера! Поскольку у частицы нет энергии для преодоления барьера, метафорически говорят, что она туннелирует сквозь него.

Дискретный спектр атомов

В начале двадцатого века наука все еще не была уверена в реальном существовании атомов. В то время дискуссия велась преимущественно среди химиков. Они знали, что химические вещества разлагаются на определенные элементы, которые дальше уже не поддаются разложению путем химических реакций. При этом разложение всегда происходило в целочисленных соотношениях, что наводило на мысль о том, что элементы, возможно, являются мельчайшими структурами, не подлежащими дальнейшему разделению.

Физики включились в обсуждение через термодинамику и теорию электромагнетизма. Они обнаружили, что при подведении энергии к атомам те иногда испускают определенные специфические линии света. Изучение этого электромагнитного спектра энергии, известного также как спектральные линии, породило отдельную научную отрасль — спектроскопию. Эта область исследований берет начало в 1860-х годах, то есть задолго до появления квантовой физики. В начале двадцатого века химики и физики приняли идею о том, что атомы представляют собой физические структуры. Новая область квантовой физики оказалась фундаментальной для тех, кто изучал спектроскопию и взаимодействие материи с энергией.

Моделирование квантованной природы атомов и орбиталей стало еще одним триумфом квантовой физики. Выяснилось, что электроны в атоме не могут иметь произвольную энергию, а только определенные разрешенные квантованные энергетические уровни — и это стало одним из краеугольных камней квантовой физики.

Гармонический осциллятор

Гармоническому осциллятору посвящена вся девятая глава, но стоит упомянуть его и здесь. Квантование гармонических осцилляторов на микроуровне стало еще одним достижением квантовой физики. В классической физике гармонические осцилляторы могут иметь любую энергию — но не в квантовой механике.



ЗАПОМНИ

Когда физик наблюдает за частицей, существующей в течение какого-то времени, он на самом деле имеет дело с чем-то, что ведет себя как квантовый гармонический осциллятор. Атомы в кристаллической решетке или в составе молекулы можно рассматривать как осцилляторы. Частицы, захваченные в энергетических ямах или оптических ловушках, в т.ч. в основе физики квантовых вычислений, также опираются на эту модель.

Прямоугольные ямы

Как и в случае с гармоническими осцилляторами, квантование частиц, связанных в прямоугольных потенциальных ямах на микроуровне, стало еще одним триумфом квантовой физики. Этому подробно посвящена восьмая глава, во многом потому, что это одна из тех задач, которые квантовая физика действительно умеет решать точно. В классической физике частицы в потенциальных ямах могут иметь любую энергию, но квантовая физика говорит, что возможны только определенные разрешенные энергетические состояния.

Кот Шрёдингера

Кот Шрёдингера — это мысленный эксперимент, который показывает некоторые проблемы, возникающие в макром мире из-за представления о спине электронов как о полностью неопределенном до момента измерения. Например, если вы знаете спин одного из пары только что созданных электронов, то другой должен иметь противоположный спин. Так что если разнести два электрона на световые годы и затем измерить спин одного электрона, мгновенно ли «схлопывается» спин другого электрона до противоположного значения — даже на расстоянии, которое сигналу от первого электрона потребовались бы годы, чтобы преодолеть? Непростой вопрос! Парадокс, лежащий в основе этого мысленного эксперимента, подробно рассматривается в главе 6, так что обратитесь к ней за деталями этой горячей дискуссии.

Предметный указатель

А

Абсолютно черное тело
излучение, 58
Амплитуда, 33
модулированная, 34
постоянная, 33
Андерсон, Филип У., 307
Анод, 50
Антиматерия, 94, 307
Антисимметрия, 312
Антифотон, 94
Античный атомизм, 47
Аристотель, 47
Аспе, Ален, 119
Атом, 46, 47
в возбужденном энергетическом
состоянии, 100
дискретный спектр, 340
многоэлектронный, 303
простейший, 277
структура, 85
электронная структура, 320
ядерные силы, 85
ядро, 84
Атомизм, 278
Атомная гипотеза, 46

Б

Бальмер, Иоганн
уравнение, 68
Барион, 234
Барионная асимметрия, 308
Барионная материя, 307
Белл, Джон, 118
неравенство, 119

Бозон, 92, 233
W-, 85
Z-, 85
калибровочный, 97, 98
слабый, 234
Хиггса, 86, 98, 234
Большой адронный коллайдер, 99
Бом, Дэвид, 114
Бор, Нильс, 62, 65, 90, 112, 278, 332
атомная модель, 85
наследие, 68
Борн, Макс, 62, 75, 335
Борновское приближение, 336
Бра-кет нотация, 126
Бройль, Луи де, 62, 69, 92, 114, 333
Бунзен, Роберт, 49
Вектор, 30, 123
безбазисный, 129
бра-, 128
кет-, 128, 130
ортогональность, 131
ортонормированность, 131
скалярное произведение, 250
собственное значение, 144
собственный, 144, 147, 148
состояния, 127

В

Векторная алгебра, 127
Векторное поле, 43
Вероятность, 21, 51, 72
вычисление, 52
интерпретация, 108
относительная, 124
упрощение анализа, 52

Вильсона, камеры, 71
 Виртуальные частицы, 81
 Водород, 277
 уравнение Шрёдингера для атома, 279
 Волна, 33
 амплитуда, 33
 впадина, 34
 гребень, 34
 длина, 34
 интерференция, 36
 механическая, 33
 непрерывная, 33
 период, 34
 поперечная, 35
 продольная, 35
 скорость, 34
 суперпозиция, 35
 фронт, 36
 характеристики, 33
 частота, 34
 электромагнитная, 41, 82
 Волновая механика, 154
 Волновая функция, 75, 154
 антисимметричная, 308, 313
 двухчастичных систем, 316
 для кубического потенциала, 266
 для спиновых состояний, 307
 добавление временной зависимости в, 165
 заряженного осциллятора, 325
 интенсивность, 75
 использование, 75
 коллапс, 112
 нахождение выражения для, 156
 нормировка, 164
 радиальная часть, 266
 симметричная, 308, 313
 систем из трех и более частиц, 318
 угловая часть, 266
 Волновой пакет, 188, 253
 гауссов, 189

Г
 Галилей, Галилео, 28
 Гамильтониан, 132, 186, 244, 301
 возмущения невырожденного, 323
 построение, 206
 стационарный, 313
 Гармонический осциллятор, 185, 340
 в электрических полях, 324
 гамильтониан, 186
 изотропный, 271, 282
 нахождение собственных состояний энергии, 197
 операторы, 189
 трехмерный, 268
 энергетический спектр квантового, 190
 Гаудсмит, Сэмюэл А., 231
 Гейзенберг, Вернер, 62, 73, 94, 278, 333
 матричный подход к квантовой физике, 151
 принцип неопределенности, 73
 Гелл-Манн, Мюррей, 62, 83, 336
 Герлах, Вальтер, 230
 Гильбертово пространство, 123
 Глюон, 85, 98, 234
 виртуальный, 98
 Гравитационное поле, 43
 Гравитация, 43, 99
 квантовая, 99
 Гравитон, 99, 234
 Градиент, 132
 Групповая динамика, 299
 Гюйгенс, Христиан, 37

Д
 Дайсон, Джон, 83
 Дальтон, Джон, 47
 Движение объектов, 28
 Декарт, Рене, 37
 Демокрит, 47

Джоуль (единица измерения), 30
Дирак, Поль, 62, 71, 78, 94, 334
 обозначения, 126

Дискретный спектр атомов, 340
Дифференциальное исчисление, 28
Дифференциальное сечение, 332
Дифференциальное уравнение
 второго порядка, 155

Ж

Жуткое действие на расстоянии, 116

З

Закон

 Ампера-Максвелла, 44
 Вина, 60
 Рэлея-Джинса, 60
 электромагнитной индукции
 Фарадея-Максвелла, 44

Законы

 всемирного тяготения, 28
 движения, 28, 29
 оптики, 28
 термодинамики, 50

Запутанность, 24, 110

Звезды, 103

И

Излучение

 вынужденное, 100
 спонтанное, 100
 электромагнитное, 41

Импульс, 30, 96, 132

Интегральное исчисление, 28, 152

Интерпретации квантовой физики,
 111

 копенгагенская, 112
 многомировая, 113
 поиск полной, 118
 скрытых параметров, 113

Интерференция, 36, 76
 деструктивная, 36
 конструктивная, 36
Инфракрасное излучение, 41

К

Катод, 50

Квантование, 21, 58, 89

Квантовая механика, 22, 72, 89
 представление в непрерывном
 базисе, 152

Квантовая теория поля, 79, 95

Квантовая физика, 19, 20
 интерпретации, 111
 ключевые идеи, 20
 масштаб, 21
 математика, 123
 матричный подход к, 151
 отличия от законов Ньютона, 338
 пионеры, 331
 триумфы, 337

Квантовая хромодинамика (КХД),
 98

Квантовая электродинамика (КЭД),
 77, 82, 96

Квантовое туннелирование, 180, 339

Квантовые компьютеры, 104
 возможности, 105

Квантовые состояния частиц, 89

Квантовые числа, 89
 радиальные, 293
 цвет, 98

Квантовый осциллятор, 187

Кварк, 85, 98, 233

Кеплер, Иоганн, 28

Кирхгоф, Густав, 49, 58

Классическая
 механика, 28
 физика, 27
 электродинамика, 82

Клаузер, Джон, 119

Комплексное сопряжение, 128
Комптон, Артур
 эффект, 65
Константа, 172
Коперник, Николай, 28
Корпускулярно-волновой дуализм,
 71, 92, 337
 значение, 93
 происхождение, 92
Коэффициент
 жесткости, 186
 отражения, 171
 прохождения, 171
Кубит, 91, 104
Кубический потенциал, 264

Л

Лагерра, обобщенный полином, 302
Лазер, 100
Лаплас, Пьер-Симон, 43
Лапласиан, 133
Лежандра
 дифференциальные уравнения,
 232, 233
 полиномы, 233
 функции, 233
Лептон, 233
Лукреций, 47

М

Магнетизм, 40
Мазер, 100
Майкельсон, Альберт, 46
Майкельсона-Морли, интерферо-
 метр, 45
Максвелл, Джеймс Клерк
 уравнения, 42
Масштаб, 21
Математические начала натураль-
 ной философии, 28

Математический анализ, 28
 применение к движению, 30
Матрица, 217
 единичная, 147
 Паули, 236, 241
Матричная механика, 151
Матричное умножение, 129
Мезон, 234
Менделеев, Дмитрий Иванович, 48
Милликен, Роберт Эндрюс, 62
Многочастичные системы, 300
Молекулярный уровень, 205
Морли, Эдвард, 46

Н

Натурфилософы, 23
Нейтрон, 83, 85, 98
Нелокальность, 24
Неопределенность, 21, 53
 количественное описание, 73
 при измерениях, 73
 принцип, 73
Нильс Бор
 атомная модель, 68
Нормированные сферические гар-
 моники, 235
Ньютон (единица измерения), 30
Ньютон, Исаак, 27, 28, 43

О

Обменное вырождение, 313
Оператор, 132
 антикоммутатор, 140
 антиэрмитов, 140
 Гамильтона, 132, 186, 206, 244, 301
 градиента, 132
 дифференциальный, 263
 единичный, 132
 импульса, 132, 207
 коммутация, 139, 208

Лапласа, 133, 263

линейный, 135

обмена, 307

обратный, 150

перестановки, 316

повышения, 221

положения, 207

понижения, 221

рождения, 189

спина, 235

среднее значение, 133

умножение, 133

унитарный, 150

уничтожения, 189

эрмитов, 137

Ошибочность интуиции, 23

П

Парадокс

кота Шрёдингера, 110, 115, 341

Эйнштейна-Подольского-Розена
(ЭПР), 110, 117

Паули, Вольфганг, 62, 278

принцип запрета, 320

Периодическая таблица, 320

Перрен, Жан-Батист, 62, 279

Планк, Макс, 60, 61, 65, 96, 331

правило квантования, 61

Платон, 47

Погрешности измерений, 54

Подольский, Борис, 116

Позитрон, 71, 81, 94

Поле

векторное, 43, 96

гравитационное, 43

квантовая теория, 95

магнитное, 43

электромагнитное, 43

Полная энергия системы, 188

Полупроводник, 101

Постулат симметризации, 312

Постулирование спина, 338

Потенциал

кубический, 264

трехмерной пружины, 268

трехмерный, 256

центрально-симметричный, 263

Потенциальная ступенька, 169

Потенциальная яма, 152

бесконечно глубокая, 156

выход из, 155

ловля частиц в, 154

прямоугольная, 152

связывание частиц в, 155

симметричная прямоугольная, 167

сферически-симметричная
прямоугольная, 276

Потенциальный барьер, 180

Потенциальный ящик, 153

Принцип запрета Паули, 320

Принцип неопределенности Гей-
зенберга, 73, 141, 339

применение в физике частиц, 74

энергетически-временная версия,
74

Проводник, 101

Пространство элементарных собы-
тий, 52

Протон, 83, 85, 98

Прямоугольная яма, 341

Прямоугольные координаты, 235,
243

Р

Радиус Бора, 162

Резерфорд, Эрнест, 278

модель атома, 67

Риттер, Вильгельм, 41

Розен, Натан, 116

С

Свет

видимый, 41

дифракция, 38

- как волна, 64
- как частицы, 62
- квантовая электродинамика, 77
- лазер, 100
- новый взгляд на, 77
- солнечный, 104
- спор о природе, 37
- теории, объясняющие поведение, 38
- эксперимент с двумя щелями, 39
- Сила, 29
- Симметрия, 266, 307, 312
 - анти-, 312
 - перестановок, 306
- Система координат
 - прямоугольная, 224
 - сферическая, 224
- Система центра масс, 332
- Скаляр, 31, 132
- Скептицизм, 24
- Собственное значение, 144
 - вырожденное, 146
 - нахождение, 147
 - повышающего и понижающего операторов, 216
 - углового момента, 211
- Собственное состояние, 188, 193
- Солвей, Эрнест, 65
- Спектроскопия, 48
- Спин, 90, 229, 231
 - влияние на вырождение, 307
 - операторы, 235
 - постулирование, 338
 - собственные состояния, 238
- Статистические понятия
 - дисперсия, 54
 - среднеквадратическое отклонение, 54
- Столкновение частиц, 84
- Стоуни, Джордж Джонстон, 49
- Субатомные частицы, 85

- Суперпозиция, 35
 - волн, 76
 - состояний, 105
- Сферические координаты, 223
 - решение задач в, 261
 - собственные функции в, 228
- Сферические функции Бесселя и Неймана, 272

Т

- Теорема Гаусса для магнитного поля, 44
- Теория
 - возмущений, 79, 321
 - всего, 99
 - относительности, 99
 - рассеяния, 329
 - суперструн, 99
- Тепло, 50
- Термодинамика, 50
 - законы, 50
- Термоядерный синтез, 103
- Томонага, Синъитиро, 62, 83
- Томсон, Дж. Дж., 48
- Транзистор, 102
- Трехмерный потенциал, 256

У

- Угловой момент, 90, 205, 206
 - интерпретация через матрицы, 217
 - собственное значение, 211
 - создание собственных состояний, 210
- Уленбек, Джордж Ю., 231
- Уравнение Шрёдингера, 155, 263, 277
 - в 3D, 243
 - для атома водорода, 279
 - преобразование в прямоугольные координаты, 244
 - разделение, 245
 - решение радиального, 288

Ускорение, 29
Ускоритель частиц, 84

Ф

Фарадей, Майкл, 40
Фейнман, Ричард, 24, 46, 62, 80, 335
 диаграммы, 80
Фермион, 92, 233
Физика
 квантовая, 20, 57
 классическая, 20, 27
Фотон, 64, 83, 234
 виртуальный, 98
Фотоэффект, 62, 337
Франклин, Бенджамин, 49

Х

Хаггинс, Маргарет, 49
Хаггинс, Уильям, 49
Хиггс, Питер, 99
Химия, 47

Ч

Частица
 амплитуда рассеяния бесспиновых, 335
 двойственная природа, 69
 множество разных, 309
 множество тождественных, 310
 перестановка, 307
 работа с множеством, 299
 рассеяние, 331
 свободная, 186, 247
 свободная (в трехмерном пространстве), 268
 столкновение, 329
 тождественные невзаимодействующие, 314

Ш

Шварца, неравенство, 130
Швингер, Джулиан, 62, 83

Шрёдингер, Эрвин, 62, 115, 152, 279, 334
 стационарное уравнение, 155
Штерн, Отто, 230
Штерна-Герлаха, эксперимент, 230

Э

Эверетт III, Хью, 113
Эйнштейн, Альберт, 27, 46, 48, 61, 72, 100, 116, 278, 332
Эксперимент, 23
Электричество, 40
Электромагнетизм, 43, 97
Электромагнитный спектр, 41
 видимый свет, 41
 гамма-лучи, 41
 инфракрасное излучение, 41
 микроволны, 41
 радиоволны, 41
 рентгеновские лучи, 41
 ультрафиолетовое излучение, 41
Электрон, 19, 48, 50, 90
 оболочки, 320
 переход с одной орбиты на другую, 69
Электронная оболочка, 320
 заполнение, 321
 структура, 321
Электронно-лучевая трубка, 50
Энергетические уровни, 161
 вырождение, 266, 305
Энергия, 30, 96
 вращательная (двухатомной молекулы), 215
 гравитационная потенциальная, 32
 кинетическая, 30, 32
 потенциальная, 152
 солнечная, 103
 тепловая, 32
 термоядерного синтеза, 103

трехмерного осциллятора, 271
химическая, 32
электрическая, 32
электромагнитная, 41
ядерная, 32, 102
Эпикур, 47
Эрмита, полиномы, 206
Эрмитово сопряжение, 137
Эфир, 37, 44, 77
Эффект наблюдателя, 108, 112

Ю

Юнг, Томас, 39

Я

Ядерная бомба, 102
Ядерное взаимодействие
 сильное, 85, 97
 слабое, 85, 97
Ядерное деление, 102
Ядерные силы, 97

Благодарности

Прежде всего Эндрю хотел бы поблагодарить свою жену Эмбер и сыновей Элайджу и Гидеона за их поддержку, даже когда он сходил с ума от дедлайнов, бесконечных правок и превратностей обычной жизни. Он также хотел бы выразить благодарность всем учителям, наставникам, ученым и авторам, которые учили его на протяжении многих лет. Их слишком много, чтобы перечислить всех поименно.

Эта книга не была бы возможна без работы покойного доктора Стивена Хольцнера, автора книги «Квантовая физика для чайников» (пересмотренное издание). Его обширная работа над ранними версиями этой книги заложила прочный фундамент для дальнейшего развития. Эндрю также хотел бы выразить глубочайшую признательность замечательной редакторской команде, работавшей над этим проектом. Он благодарен Элизабет Стилвелл за то, что она поверила в него и предложила эту возможность, а также доверилась его рекомендациям о том, как продвигать проект. Невозможно выразить словами, сколько труда редактор проекта Лия Майкл и литературный редактор Мэрилуиз Вьяк вложили в превращение многословных черновиков, полных эзотерического технического жаргона, в четкие и лаконичные объяснения этих сложных концепций. Работать с ними было истинным удовольствием в каждый момент.

Все права защищены. Книга или любая ее часть не может быть скопирована, воспроизведена в электронной или механической форме, в виде фотокопии, записи в память ЭВМ, репродукции или каким-либо иным способом, а также использована в любой информационной системе без получения разрешения от издателя. Копирование, воспроизведение и иное использование книги или ее части без согласия издателя является незаконным и влечет уголовную, административную и гражданскую ответственность.

Пособие для развивающего обучения
Для среднего школьного возраста
ДЛЯ ЧАЙНИКОВ

Джонс Эндрю Циммерман
КВАНТОВАЯ ФИЗИКА ДЛЯ ЧАЙНИКОВ

Главный редактор *Р. Фасхутдинов*
Начальник отдела *В. Обручев*
Руководитель группы *Ю. Лаврова*
Ответственный редактор *А. Высочкина*
Научный редактор *Н. Уткин*
Художественный редактор *А. Гусев*
Компьютерная верстка *А. Григорьева*
Корректоры *Е. Лоренц, В. Кулькова*

Страна происхождения: Российская Федерация
Шығарушы ел: Ресей Федерациясы

ООО «Издательство «Эксмо»
123308, Россия, г. Москва, ул. Зорге, д. 1, стр. 1, эт. 20, каб. 2013. Тел.: 8 (495) 411-68-86.
Home page: www.eksmo.ru E-mail: info@eksmo.ru

Өндіруші: «Издательство «Эксмо» ЖШҚ
123308, Ресей, Мәскеу қаласы, Зорге көшесі, 1-үй, 1-құрылыс, 20 қабат, 2013-каб.
Тел.: 8 (495) 411-68-86. Home page: www.eksmo.ru E-mail: info@eksmo.ru
Tayyar belrici: «Эксмо»

Интернет-магазин : www.book24.ru

Интернет-магазин : www.book24.kz

Интернет-дүкен : www.book24.kz

Импортёр в Республику Казахстан ТОО «РДЦ-Алматы».
Қазақстан Республикасына импорттаушы «РДЦ-Алматы» ЖШС.
Дистрибьютор и представитель по приему претензий на продукцию
в Республике Казахстан: ТОО «РДЦ-Алматы»

ТОО РДЦ Алматы, Алматы, ул. Домбровского, 3-а, литер Б, офис 1.

Дистрибьютор және Қазақстан Республикасында өнімге шағымдар
қабылдау жөніндегі өкіл: «РДЦ-Алматы» ЖШС.

Алматы қ., Домбровский көш., 3 «а», литер Б, офис 1.
Тел.: 8 (727) 251-59-90/91/92. E-mail: RDC-Almaty@eksmo.kz

Сведения о подтверждении соответствия издания согласно законодательству РФ
о техническом регулировании можно получить на сайте Издательства «Эксмо»:
www.eksmo.ru/certification

Техникалық реттеу туралы РФ заңнамасына сай басылымның сәйкестігін растау
туралы мәліметтерді мына адрес бойынша алуға болады: <http://eksmo.ru/certification>

Произведено в Российской Федерации
Ресей Федерациясында өндірілген

Сертификаттауға жатпайды



Дата изготовления / Подписано в печать 21.11.2025. Формат 70х100¹/₁₆.
Гарнитура «Newton». Печать офсетная. Усл. печ. л. 28,52.
Тираж экз. Заказ



**ЧИТАЙТЕ
И СЛУШАЙТЕ
В Литрес**



БОМБОРА – лидер на рынке полезных и вдохновляющих книг.
Мы любим книги и создаем их, чтобы вы могли творить, открывать
мир, пробовать новое, расти. Быть счастливыми. Быть на волне.

bombora.ru bomborabooks bombora

Москва. ООО «Торговый Дом «Эксмо»

Адрес: 123308, г. Москва, ул. Зорге, д.1, строение 1.
Телефон: +7 (495) 411-50-74. **E-mail:** reception@eksmono-sale.ru

По вопросам приобретения книг «Эксмо» зарубежными оптовыми
покупателями обращаться в отдел зарубежных продаж ТД «Эксмо»
E-mail: international@eksmono-sale.ru

*International Sales: International wholesale customers should contact
Foreign Sales Department of Trading House «Eksmo» for their orders.
international@eksmono-sale.ru*

По вопросам заказа книг корпоративным клиентам, в том числе в специальном
оформлении, обращаться по тел.: +7 (495) 411-68-59, доб. 2151.
E-mail: borodkin.da@eksmono.ru

Оптовая торговля бумажно-беловыми
и канцелярскими товарами для школы и офиса «Канц-Эксмо»:
Компания «Канц-Эксмо»: 142702, Московская обл., Ленинский р-н, г. Видное-2,
Белокаменное ш., д. 1, а/я 5. Тел./факс: +7 (495) 745-28-87 (многоканальный).
e-mail: kanc@eksmono-sale.ru, сайт: www.kanc-eksmono.ru

Филиал «Торгового Дома «Эксмо» в Нижнем Новгороде
Адрес: 603094, г. Нижний Новгород, улица Карпинского, д. 29, бизнес-парк «Грин Плаза»
Телефон: +7 (831) 216-15-91 (92, 93, 94). **E-mail: reception@eksmonn.ru**

Филиал ООО «Издательство «Эксмо» в г. Санкт-Петербурге
Адрес: 192029, г. Санкт-Петербург, пр. Обуховской обороны, д. 84, лит. «Е»
Телефон: +7 (812) 365-46-03 / 04. **E-mail: server@szko.ru**

Филиал ООО «Издательство «Эксмо» в г. Екатеринбург
Адрес: 620024, г. Екатеринбург, ул. Новинская, д. 2щ
Телефон: +7 (343) 272-72-01 (02/03/04/05/06/08)

Филиал ООО «Издательство «Эксмо» в г. Самаре
Адрес: 443052, г. Самара, пр-т Кирова, д. 75/1, лит. «Е»
Телефон: +7 (846) 207-55-50. **E-mail: RDC-samara@mail.ru**

Филиал ООО «Издательство «Эксмо» в г. Ростове-на-Дону
Адрес: 344023, г. Ростов-на-Дону, ул. Страны Советов, 44А
Телефон: +7(863) 303-62-10. **E-mail: info@rnd.eksmono.ru**

Филиал ООО «Издательство «Эксмо» в г. Новосибирске
Адрес: 630015, г. Новосибирск, Комбинатский пер., д. 3
Телефон: +7(383) 289-91-42. **E-mail: eksmono-nsk@yandex.ru**

Обособленное подразделение в г. Хабаровске
Фактический адрес: 680000, г. Хабаровск, ул. Фрунзе, 22, оф. 703
Почтовый адрес: 680020, г. Хабаровск, А/Я 1006
Телефон: (4212) 910-120, 910-211. **E-mail: eksmono-khv@mail.ru**

Республика Беларусь: ООО «ЭКМО АСТ Си энд Си»
Центр оптово-розничных продаж Cash&Carry в г. Минск
Адрес: 220014, Республика Беларусь, г. Минск, проспект Жукова, 44, пом. 1-17, ТЦ «Outleto»
Телефон: +375 17 251-40-23; +375 44 581-81-92
Режим работы: с 10.00 до 22.00. **E-mail: exmoast@yandex.by**

Казахстан: «РДЦ Алматы»
Адрес: 050039, г. Алматы, ул. Домбровского, 3А
Телефон: +7 (727) 251-58-12, 251-59-90 (91,92,99). **E-mail: RDC-Almaty@eksmono.kz**

**Полный ассортимент продукции ООО «Издательство «Эксмо» можно приобрести в книжных
магазинах «Читай-город» и заказать в интернет-магазине: www.chitai-gorod.ru.**
Телефон единой справочной службы: 8 (800) 444-8-444. Звонок по России бесплатный.

Интернет-магазин ООО «Издательство «Эксмо»
www.eksmono.ru

Розничная продажа книг с доставкой по всему миру.
Тел.: +7 (495) 745-89-14. **E-mail: imarket@eksmono-sale.ru**



eksmono.ru

Официальный
интернет-магазин
издательства «Эксмо»



Хочешь стать
автором «Эксмо»?

ЧИТАЙ·ГОРОД



ISBN 978-5-04-223168-1



9 785042 231681 >

Разберитесь, как устроена музыка изнутри

Атомы и кванты — микрокирпичики Вселенной — строят этот мир по особым правилам. «Квантовая физика для чайников» даст вам четкое понимание этих правил и фундаментальных идей квантового мира без необходимости углубляться в сложную математику. После прочтения книги вы сможете разобраться в ключевых теориях, получите представление о квантовых числах, суперпозиции состояний, уравнении Шредингера, принципе неопределенности и квантовой запутанности, поймете, почему классическая физика уступила место квантовой. У вас сложится целостная картина главных достижений квантовой физики, сформировавших современный мир науки.



В этой книге вы найдете:

- Основные принципы квантовой физики — поймете их суть.
- Обзор классической физики — освежите основы.
- Методы решения уравнения Шредингера — научитесь применять их на практике
- Описание квантовых явлений — разберетесь в ключевых понятиях
- Практические задачи — закрепите знания

Эндрю Циммерман Джонс — исследователь, педагог и научный писатель, обладатель степеней по физике и математике. Его миссия — делать науку доступной для всех.

Все издания серии **для чайников** — это ваш надежный проводник в мире новых знаний!

ISBN 978-5-04-223168-1



9 785042 231681 >



БОМБОРА — лидер на рынке полезных и вдохновляющих книг. Мы любим книги и создаем их, чтобы вы могли творить, открывать мир, пробовать новое, расти. Быть счастливыми. Быть на волне.