



ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ФИЗИКУ

РУБЦОВ
АЛЕКСЕЙ НИКОЛАЕВИЧ

ФИЗФАК МГУ

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

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

Содержание

1	Лекция 1. Введение в квантовую физику	6
1.1	О квантовой физике: предмет, общие положения, подходы, единицы измерения, основные константы	6
1.2	Постоянная Планка. История возникновения квантовой физики. Формула Планка. Спектр излучения нагретого тела. Законы Вина	7
1.3	Закон Рэлея-Джинса	10
1.4	Работы Эйнштейна. Фотоэффект. Люминесценция. Законы фотоэффекта	11
1.5	Ультрафиолетовая катастрофа	14
1.6	Неравенства Белла	16
1.7	Соотношение классической и квантовой физики	16
1.8	Атомная система единиц. Фундаментальные константы	17
2	Лекция 2. Корпускулярные и волновые свойства света	19
2.1	История физики. Энергия и импульс релятивистских частиц. Эффект Комптона	19
2.2	Волновые свойства света. Опыт Юнга-Френеля	23
2.3	Опыт Винера. Стоячие волны	24
2.4	Копенгагенская интерпретация квантовой теории (вероятностный характер квантовой теории). Многомировая интерпретация квантовой теории	26
2.5	Волновая функция. Стационарный случай	28
2.6	Соотношение неопределенности Гейзенберга	32
2.7	Нестационарный случай. Выводы. Заключение	32
2.8	Модели атомов. Модель атома Томсона. Опыт Резерфорда. Модель атома Резерфорда	33
3	Лекция 3. Корпускулярно-волновой дуализм. Строение атома	36
3.1	Модель Томсона	36
3.2	Описание Бора	38
3.3	Описание Де-Бройля	40
4	Лекция 4. Частица в потенциальной яме	51
4.1	Уравнение Шредингера	51
4.2	Стационарное состояние. Стационарное уравнение Шредингера	58
5	Лекция 5. Волновая функция и уравнение Шредингера	67
5.1	Уравнение Шредингера. Стационарный случай	67
5.2	Эволюция фазы во времени. Физический смысл скорости вращения фазы. Эффект Ааронова-Бома	68

5.3	Решение стационарного уравнения Шредингера для случая потенциальной ямы	72
5.4	Туннелирование. Бесконечно глубокая яма. Дискретный спектр	76
5.5	Симметрия волновых функций	80
6	Лекция 6. Простейшие модели квантовой механики	82
6.1	Повторение материала предыдущей лекции	82
6.2	Эффект туннелирования. Экспериментальное обнаружение	82
6.3	Задача о потенциальной яме произвольного вида. Приближение ВКБ. Вероятность туннелирования в единицу времени	84
6.4	Туннелирование релятивистских частиц. Парадокс Клейна	87
6.5	Альфа-распад нестабильных ядер. Закон Гейгера-Нетолла	87
6.6	Модель гармонического осциллятора. Анология с ЭМ полем. Спектр квантового гармонического осциллятора	90
6.7	Операторная алгебра. Коммутаторы	94
6.8	Спектр гармонического осциллятора: продолжение	95
7	Лекция 7. Неразличимость частиц	98
7.1	Движение двух частиц. Бозе	98
7.2	Конденсация Бозе-Эйнштейна	104
7.3	Свойства уравнения Шредингера	106
8	Лекция 8. Спектры атомов и молекул	113
8.1	Водородоподобные системы	113
8.2	Спектр атома водорода	113
8.3	Излучение при переходе атома из одного состояния в другое. Серия Лаймана, серия Бальмера.	115
8.4	Устройство атомов, отличных от атома водорода	116
8.5	Спин электрона. Эксперимент Штерна-Герлаха	117
8.6	Фермион и бозоны. Принцип Паули. Заполнение электронных оболочек	120
8.7	Спектр атомов щелочных металлов	121
8.8	Атомы побочных групп. Правило Маделунга-Клечковского	124
8.9	Рентгеновские термы (внутреннее строение атомов)	124
8.10	Механизмы связи молекул. Ионная связь. Ковалентная связь	124
8.11	Молекулярные спектры. Колебательный спектр	128
9	Лекция 9. Системы многих частиц	131
9.1	Вращательный спектр молекулы	132
9.2	Комбинационное рассеяние. История присуждения нобелевской премии за комбинационное рассеяние	134
9.3	Кристаллическая решетка	136

9.4	Одномерная цепочка атомов. Фононы	137
9.5	Термодинамика фононного газа	142
9.6	Электронные свойства твердых тел. Электрон в периодическом потен- циале. Теорема Блоха. Основы зонной теории	148
10	Лекция 10. Квантовая электроника	150
10.1	Повторение: теорема Блоха	150
10.2	Закон дисперсии для свободной частицы. Квазичастицы	150
10.3	Брэгговское условие рассеяния на решетке. Запрещенные зоны	153
10.4	Зонная теория	155
10.5	Движение волнового пакета в среде с произвольным законом диспер- сии. Фазовая и групповая скорости	157
10.6	Полупроводники. Электроны и дырки. Эффективная масса	159
10.7	Квантовая электроника. Вынужденные переходы. Спонтанные перехо- ды. Коэффициенты Эйнштейна	160
10.8	Лазеры	163
10.9	Лазер на свободных электронах	165
11	Лекция 11. Распределение Ферми-Дирака. Квантовая запутанность.	
	Классическая информация	167
11.1	Часть 1. Распределение Ферми-Дирака. Свойства электронов в метал- лах при конечной температуре	167
11.2	Отступление от программы: что происходит в металле на самом деле (о взаимодействии электронов)	173
11.3	Часть 2. Квантовая запутанность. Классическая информация	175
11.4	Область квантовой теории	178
11.5	Преобразования кубита	180
11.6	Пространство состояний. Теорема Холево	181
11.7	Смысл квантовой информации. Теорема о запрете клонирования	184
11.8	Квантовая криптография	186
11.9	Системы шифрования. Квантовое распределение ключа	187
11.10	Протокол BB84	190
12	Лекция 12. Квантовая запутанность. Продолжение	194
12.1	Квантовая запутанность	194
12.2	Экспериментальная проверка и неравенства Белла	199
12.3	Квантовая телепортация	209

Лекция 1. Введение в квантовую физику

О квантовой физике: предмет, общие положения, подходы, единицы измерения, основные константы

Вероятно, нет другой области физики, которую окружало бы такое большое количество мифов. Сравнительно молодая область физики, ей чуть больше ста лет. Контринтуитивная, то есть многие объекты или многие принципы, на которых квантовая физика основана, противоречат обыденному сознанию, поэтому очень интересна для изложения в популярных источниках.

В квантовой физике, в квантовом мире все измеряется порциями. Все происходит по законам вероятности. Во-первых, эти утверждения неправильные, не все измеряется порциями, не все происходит по законам теории вероятности. Во-вторых, они достаточно несодержательные. Физика — точная наука, и те или иные словесные утверждения годятся, когда под ними лежит какая-то математика. Что выделяет квантовую физику среди физики в целом? Математический аппарат? Это утверждение более правильное. Математический аппарат в квантовой физике специальный, но это тоже в каком-то смысле не исходное. Например, можно указать, что разных внешних формулировок квантовой физики три, они действительно сильно различаются. Это формулировка Гейзенберга, Шредингера и Фейнмана, но не , что из-за этого есть три разных области Физики. Это одна и та же квантовая физика. Доказана эквивалентность соответствующих подходов. Помимо математического аппарата есть еще одна важная, наиболее фундаментальная черта, которая выделяет ту или иную область физики на фоне общей картины. Это совокупность мировых констант, с которыми теория оперирует.

Возьмем пример известный из механики гравитирующих систем — обращение земли вокруг солнца. Допустим, мы внезапно забыли законы Ньютона, уравнение движения, все, что знаем о движении и о гравитации. Но есть очень хорошие средства измерения. Эти средства измерения позволяют узнать массу солнца. Масса солнца $M = 2 \cdot 10^{30}$ кг. И характерное расстояние между землей и солнцем 150 миллионов километров $R = 1,5 \cdot 10^{11}$ м. Зная эту информацию, определить продолжительность земного года нельзя, потому что год это секунды, а тут килограммы и метры. Из соображений размерности из килограммов и метров невозможно склеить такую комбинацию, которая имеет размерность времени. Нужна некая фундаментальная постоянная. Это - *гравитационная постоянная* $G = 6,7 \cdot 10^{-11}$. Выведем размерность гравитационной постоянной. Мы знаем энергию двух гравитирующих масс

$$\frac{M_1 M_2}{R} G = E$$

таким образом размерность гравитационной постоянной

$$[G] = \frac{\text{кг} * \text{м}^2}{\text{с}^2} * \frac{\text{м}}{\text{кг}^2} = \frac{\text{м}^3}{\text{кг} * \text{с}^2}$$

тогда

$$G = 6,7 * 10^{-11} \frac{\text{м}^3}{\text{кг} * \text{с}^2}$$

Соберем из этих трех констант секунды

$$T = \sqrt{\frac{R^3}{GM}}$$

Если посчитать по этой формуле, получится величина, которую можно взять в качестве оценки для продолжительности земного года. Эта формула дает величину в 2π раз меньшую, чем период обращения по круговой орбите и собственно задача уравнений теории - это вычисление в данном случае этого самого множителя 2π . Но базовая информация уже есть. Как только есть фундаментальная константа.

Постоянная Планка. История возникновения квантовой физики. Формула Планка. Спектр излучения нагретого тела. Законы Вина

Точно так же теория гравитации характеризуется наличием фундаментальной постоянной G , так же квантовый мир характеризуется тем, что появляется на свет неизвестная, новая для классической физики, постоянная h , известная как *постоянная Планка*. Постоянная Планка принимает участие практически во всех квантовых явлениях, с которых квантовая физика началась. В конце девятнадцатого века, примерно в 1896-1897 году, постоянная Планка начала появляться в работах. Это послужило началом революции физики. Длилась эта революция, как минимум, три десятка лет, до конца двадцатых годов, когда были написаны основные уравнения квантовой теории. Но на этом не закончилось, известные споры Эйнштейна с Бором длились вплоть до 60-х годов. Почти на сто лет растянулась революция в физике. Началось все с излучения нагретых тел, с попытки вывести формулу, которая сейчас известна, как формула Планка.

В конце девятнадцатого века происходит стремительное развитие экспериментальных методик. Интерес к оптике и к термодинамике. Картина мира в глазах физиков, это просто другая, не устоявшаяся, картина физического знания. Не все

еще верят в существование атомов. Планк, отец квантовой физики, в существование атомов не вполне верил. Он склонялся к такой континуальной картине мира — есть некие флюиды, которые перетекают и одним из таких флюидов он считал энтропию. То есть, статистическая механика Больцмана тоже для него была не единственной возможной теорией. Его интересовало то, как энтропия переходит от нагретого тела к излучению, и можно ли установить какие-то простые формулы для этого трансфера энтропии между излучением и веществом, которые позволят описать наблюдаемые экспериментально и вроде бы более или менее понятные законы излучения света нагретыми телами.

Спектр мощности излучения нагретого тела - для определенности надо взять количество энергии излучаемое в единицу времени единицей площади в полусферу, находящуюся перед ней. Обозначим это как $I(\omega)$ на единицу частоты, выглядят это примерно таким образом.



Рис. 1.1. $I(\omega)$ на единицу частоты

Это кривая, начинающаяся из нуля, имеющая максимум и затем достаточно быстро спадающая.

К середине девяностых годов были уже известны два закона Вина. Первый закон Вина установил рамочный характер для того, как $I(\omega)$ должно выглядеть. Говорил, что это должно быть

$$I = \omega^3 * f\left(\frac{\omega}{T}\right)$$

это было установлено из общих соображений термодинамики.

Второй, полученный из менее общих соображений, но имеющий отношение к этой кривой выглядел вот так

$$I \propto \omega^3 e^{-b\frac{\omega}{T}}$$

Второй закон Вина неплохо описывал нарисованную кривую и результат, полученный Планком в 1897 году, который фактически повторял известную формулу второго закона Вина. Планк вывел его, используя некую формулу, описывающую эффективный осциллятор. Поскольку с атомами Планк знаться не хотел, он описывал излучающее нагретое тело, как совокупность неких осцилляторов. У каждого есть собственная частота и внутренняя энтропия. Вот эта энтропия вытекала наружу и переходила в энтропию излучения. формула Планка, основанная скорее на термодинамике, чем на статистической физике, давала вот такую зависимость. Планку все представлялось логичным: и вывод, и результаты. Но в районе 1900 года стало ясно, что в области низких частот экспериментальная кривая отличается от закона Вина — несколько по-другому идет. Экспериментальная кривая выше, чем по закону.

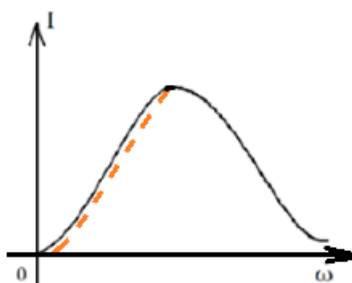


Рис. 1.2. Кривая по закону Вина

Планк опять засел за работу, он начал заново писать формулы для эффективной энтропии элементарного осциллятора, с целью получить лучшую формулу. И получил результат, который доложил на заседании немецкого физического общества, записанный уже в современных обозначениях

$$I = \frac{\hbar \omega^3}{4\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\hbar \frac{\omega}{kT}} - 1}$$

Видно, чем зрительно отличается формула Планка от формулы Вина. Фактически единицей в знаменателе. k - постоянная Больцмана. Постоянная Планка $\hbar$ - новая константа, которую надо ввести фактически уже на уровне формулы Вина. Она опять имела отношение к термодинамике этого исходного осциллятора, а потом оказалось, что носит фундаментальный характер. Размерность постоянной Планка, это

$$[\hbar] = \text{эрг} \cdot \text{с}$$

$$\hbar = 1,05 \cdot 10^{-27} \text{эрг} \cdot \text{с}$$

Когда речь шла про землю, обращающуюся вокруг солнца, была использована система «СИ», дальше будет «СГС» и так называемая атомная система. Планк написал эту формулу из полуэмпирических соображений и доложил ее на заседании немецкого физического общества в 1900 году. Экспериментаторы, было несколько групп, сверили свои данные и все подтвердили, что это новая формула замечательно описывает всю совокупность данных, расхождений нет, формула, по-видимому, правильная. И Планк обещался представить вывод этой формулы видимо думая что легко это сделает. Однако, у него ничего не получалось, он промучался три месяца. В качестве, как он потом писал, акта отчаяния, предположил, что энергия элементарного осциллятора, эффективность которого состоит в твердом теле, меняется порциями при излучении, и Величина этой порции равняется $\hbar\omega$, где $\hbar$ - новая постоянная, ω - частота испускаемого излучения. После этого Планк опубликовал вывод. Однако на тот момент, это квантование энергии при излучении представлялось ему скорее математическим трюком, позволяющим получить правильную формулу, чем каким-то свидетельством новой физики. 1900 год - время рождения квантовой механики. Время явного появления постоянной Планка и квантования энергии.

Научный мир не очень сильно заметил то, что произошло. Теория Планка была одной из теорий, которая лежала на столе, чему самое яркое свидетельство то, что классические попытки описать закон излучения нагретого тела не только не прекратились, а только началось в 1900 году.

Закон Рэлея-Джинса

Рэлей получил классическую формулу. Он ошибся в коэффициенте, его поправил Джинс. Поэтому только в 1905 году появился классический предел этой формулы. Выражение, которое получается, если думать, что какое-то классическое нагретое вещество обменивается энергией с классическим излучением, имеет вид

$$I = \frac{kT\omega^2}{4\pi^2c^2} - \text{Это выражение Рэлея-Джинса.}$$

Работы Больцмана, это восьмидесятые годы девятнадцатого века, опять не сразу получили признание, но они были известны. Планк о них знал и, выводив свою формулу, уже верил в атомную теорию. «Безобразная» формула, с точки зрения совпадения с экспериментом, правильно описывает низкочастотную область, но затем устремляется в бесконечность

Причина этого проста, классическая термодинамика устроена просто. Она в равновесии стремится поместить одинаковое количество энергии, равное постоянной Больцмана, умножить на температуру каждую степень свободы системы, которая

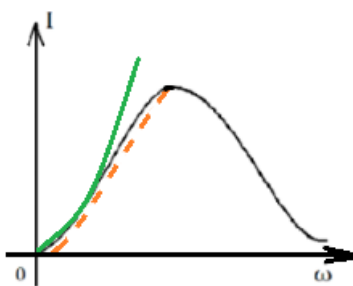


Рис. 1.3. Кривая «Безобразной» формулы

есть. Вещество состоит из атомов, поэтому степеней свободы у него много, но это число конечное, это число Авогадро на 1 моль вещества. Если говорить про электромагнитное поле, про свет, то тут ситуация принципиально другая. Как бы далеко в фиолетовую область мы не двигались, электромагнитный спектр нигде не кончается. Более того, количество степеней свободы (*mod*), электромагнитного поля увеличивается по мере увеличения частоты.

В классической физике, чем выше частота, тем больше нагретое тело должно излучать. Почему-то Рэля с Джинсом и всех остальных это не очень беспокоило. Их интересовало правильное описание хотя бы в этой области, которое и было получено

Работы Эйнштейна. Фотоэффект. Люминесценция. Законы фотоэффекта

На эту «неприятность» всерьез обратил внимание Эйнштейн, в 1905 году. 1905 год — великий год в физике, потому что Эйнштейн сделал несколько чрезвычайно хороших работ. В истории физики этот год известен как год чудес. Он выпустил в свет работу, которая называется - «Об одной эмпирической точке зрения, касающейся вопросов поглощения и излучения света». Эйнштейн пытался предотвратить возможную критику своей работы, пытался уйти, от вопросов: «Как на самом деле устроено мироздание?» к более скромному вопросу: «Как мы это мироздание проще всего будем описывать?».

Если работу почитать, то становится ясно, что Эйнштейн был уверен, что имеет дело с физикой, с физическими явлениями, с тем как природа устроена. Он начинает свои рассуждения с бесконечного количества степеней свободы излучения и принципиальной невозможности организовать классическое описание термодинамики светового поля. Эйнштейн смотрит на эту кривую, в первую очередь отмечает, что левая длинноволновая часть описывается формулой Рэля-Джинса, получены из классических соображений, и поэтому в этой области заключает, что поле действи-

тельно может быть описано на языке классической физики. Эйнштейн анализирует с точки зрения статистической физики, высокочастотный хвост формулы Планка, там где хорошо работает закон Вина и замечает, что с точки зрения термодинамики, с точки зрения энтропии на единицу объема в этой области система фотонов ведет себя точно так же, как система частиц, система корпускул, некий идеальный газ.

Делается смелый вывод - с точки зрения термодинамики перед нами газ некоторых не взаимодействующих частиц. Планк указал, что, для того чтобы получить из микроскопических соображений такое поведение, надо считать, что энергия каких-то эффективных степеней свободы в твердом теле меняется порциями. Эйнштейн пишет, что и в других явлениях свет взаимодействующий с веществом тоже в этой области ведет себя, как набор дискретных частиц, каждый из них обладающий определенной энергией $h\omega$. На основе этого предположения Эйнштейн дает описание трех, широко известных на тот момент, но совершенно необъясненных, явлений. Это люминесценция, это фотоионизация газов, это фотоэффект.

Явление, когда из поверхности металла свет выбивает электроны. *Люминесценция* - это хорошо известная вещь, потому что существует люминесцентные лампы. На стекло люминесцентной лампы расплывён люминофор, это вещество, которое излучает в видимом диапазоне, если на него падает ультрафиолетовый свет, то есть свет с более высокой частотой. Если говорить про люминесцентные лампы, то там ультрафиолетовое излучение рождается, потому что разряд подожжен в газе, которым наполнена лампа. Но вот явление люминесценция было очень неплохо известно к концу девятнадцатого века и характерным законом являлось то, что никогда люминофор не излучает свет с частотой более высокой, чем частота, которая упала на него. Эйнштейн дает простое описание, состоящее в том, что все становится ясно, если предположить, что свет и испускается, и поглощается порциями, квантами, частицами, имеющими энергию $h\omega$.

Вот тогда ясно - один квант поглотился, часть его энергии ушла в какие-то внутренние степени свободы люминофора, условно говоря, пошла на нагрев, а остаток излучился. энергия ушла в какие-то внутренние степени свободы люминофора, условно говоря, пошла на нагрев, а остаток излучился. Конечно, остаток не может быть больше, чем то, с чего начинали. Был вопрос, может ли быть по-другому, можно ли все-таки большую частоту получить? В принципе, может быть, и несложно придумать как, надо чтобы твердое тело поглотило два фотона, их энергии сложились, может быть что-то осталось в твердом теле, и результат сложения двух энергий, конечно, может дать больше, чем каждый из них по отдельности. Такое явление с удвоением или с утроением частоты известно, называется *нелинейная люминесценция*. Но для того чтобы ее увидеть экспериментально нужен очень сильный источник света. Такие

источники света это лазеры. Они появились на пятьдесят лет позже описываемых событий. После этого появилась *нелинейная оптика* со всеми подобными эффектами. Фотоны в обычном свете довольно редки, разрежены, их сравнительно мало, и очень трудно сделать так, чтобы два фотона встретились в одной точке пространства на одной молекуле люминофора.

Итак, *фотолюминесценция*. *Фотоионизация* похожий по законам эффект. Если приложить к газу электрическое поле, если это поле не слишком велико, то ток через газ не потечет. Большая часть газов, это очень хорошие диэлектрики. Однако, если посветить ультрафиолетовым светом, по крайней мере на некоторые из газов, возникает ток пропорциональный интенсивности света, который падает. И важным явлением является наличие красной границы. В большинстве случаев видимый свет не приводит к появлению фототока, надо уходить в ультрафиолет. То есть, только свет. Теперь совершенно ясно, в чем дело с фотонами, энергия которых превышает энергию, необходимую для того, чтобы разорвать молекулу газа. Молекула газа разрывается на два атома, каждый из них заряжен, возникает ток. Опять красная граница неразрывно связана с квантованием поля. В классической физике что-то такое же придумать очень трудно. Если есть какие-то молекулярные осцилляторы, мы их раскачиваем классическим полем и частота этого поля кажется не принципиальной. , в квантовой физике ничего подобного нет из-за квантования энергии при поглощении излучения света. И третье явление фотоэффекта, самое интересное из того, что Эйнштейн описывал. Если взять металлический электрод, ему пару, чтобы подавать разность потенциалов, все это поместить в стеклянную колбу, оттуда откачать воздух, принять меры к тому, чтобы почистить от окисла поверхность электродов и приложить большое напряжение. , плюс надо приложить к тому, на что будем светить, к основному металлическому электроду. Тогда можно мерить зависимость тока в такой системе, в частности от свойств падающего света.

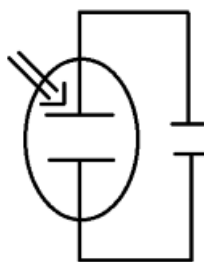


Рис. 1.4. Модель для измерения зависимости тока в системе

Фотоэффект был неплохо изучен, в меру того, что позволяла вакуумная техника того времени. К концу девятнадцатого века, уже к началу двадцатого, твердо было

установлено наличие красной границы фотоэффекта. Твердо было установлено, что если фотоэффект есть, то фототок пропорционален интенсивности падающего света. фототок пропорционален интенсивности падающего света. Эйнштейн легко объясняет эти два совершенно непонятных с точки зрения классической физики эффекта. Конечно, есть красная граница, если электрон принимает на себя один фотон. Есть некая энергия, работа выхода потребная для того, чтобы электрон из металла ушел в вакуум. Надо чтобы энергия фотона превышала работу выхода электрона. Ну и второй закон фотоэффекта - *чем больше фотонов, тем больше электрон выбивается*. Опять с точки зрения классической физики, те же самые рассуждения, которые приведены выше, красную границу понять совершенно невозможно. Казалось, какая бы частота поля ни была, достаточно сильная раскачка должна привести к тому, что электроны начнут вылетать, а этого не происходит.

Но тут Эйнштейн пошел дальше. Он предложил третий закон фотоэффекта. Действительно, если есть работа выхода и энергия фотона, то максимальная энергия электрона, вылетевшего из металла в вакуум равна разнице этих двух величин. Третий закон фотоэффекта экспериментальный, его измерить, конечно, сложнее. Нужен действительно хороший вакуум, откачать, а потом как-то проверить распределение электронов по энергиям. Коротко говоря, Эйнштейн сделал предсказание, которое потом было экспериментально проверено. И действительно предсказание оказалось в полном согласии с наблюдаемым. Таким образом, три явления, связанные с поглощением света веществом это - *фотолюминесценция, фотоэффект и фотоионизация*. Все три, характеризующиеся красной границей, Эйнштейном были объяснены. И таким образом, стало вполне понятно, что формула Планка, это не какой-то математический выверт, это не какой-то удобный способ описывать природу, а это как природа в действительности устроена. Итак, в 1905 году вышла работа Эйнштейна, еще где-то лет пять потребовалось сообществу, для того чтобы осознать, что революция все-таки произошла. Для того чтобы осознать, что классическая физика не описывает свойства взаимодействия, базовые характеристики взаимодействия излучения с веществом. Для того чтобы понять, что классическая формула Рэлея-Джинса никуда не годится.

Ультрафиолетовая катастрофа

Для того чтобы подчеркнуть принципиальную невозможность классической физики, описать высокочастотную ветвь формулы Планка, в 1911 году был введен термин *ультрафиолетовая катастрофа, ультрафиолет, высокие частоты*.

Если вспомнить большую часть популярных изложений, там все строится ровно противоположным образом. Сначала была ультрафиолетовая катастрофа, потом наверно были Рэлей и Джинс, было непонимание, а потом пришел Планк и всем

все объяснил. История не всегда развивается логичным образом. Перескочим еще на десять лет вперед. Первая мировая война и время сразу после неё, в это время было полное понимание - в 1918 году нобелевскую премию получает Планк, в 1921 году нобелевскую премию за фотоэффект получает Эйнштейн. Таким образом, от появления формулы Планка до окончательного признания прошло практически двадцать лет. В эти десять лет произошли всякие другие события физики. Квантованными оказались характеристики движения электронов в атоме, то есть не только про излучение, но и про материю стало ясно, что классической физики недостаточно. 1925-1927 годы - завершение формирования современного аппарата квантовой теории. Формулировки сначала Гейзенберга, потом Шредингера. К тридцатым годам была полная ясность правильности квантовой физики, полученная на основе развитого формализма, картина мира была достаточно полной во всех областях. И в том, что называется физикой частиц, и в том, что называется физикой твердого тела, было сделано множество блестящих, подтвердившихся на количественном уровне, предсказаний. Вопросов с точки зрения практической применимости квантовой теории не осталось. Тем не менее в сороковых годах был сделан еще один важный шаг с точки зрения понимания того, что такое квантовая наука. Это *третья формулировка Фейнмана* через интегралы по траекториям.

Дальнейшее развитие, так называемый континуальный интеграл, выходит далеко за пределы нашего курса. Надо воздать должное собственным героям - Феликс Березин очень много сделал для описания систем тождественных частиц с точки зрения математики. Также сейчас надо проговорить вопрос о якобы непонимании Эйнштейном квантовой механики. В тридцатых годах верность квантовой теории не могла вызывать сомнений ни у кого знакомого с предметом. Эйнштейн, безусловно, был знаком с предметом и, безусловно, был очень умным человеком. Он не мог не понимать, что квантовая физика является правильной. Вопрос в другом, он не думал, что квантовая теория является окончательной. Дело в том, что во многих случаях предсказания квантовой теории носят принципиально-вероятностный характер, то есть никакими средствами измерений нельзя достоверно предсказать, к чему приведет конкретный эксперимент. Это Эйнштейну не нравилось. Не нравилось на философском уровне. К этому относится его известная фраза, которую на русский обычно переводят как: «Бог не играет в кости». Эйнштейн думал, что существует некая еще более глубокая теория, в которой вероятности нет, что все формулы квантовой теории могут быть получены как проявление некой другой науки, сформулированной в терминах, так называемых, скрытых параметров.

Неравенства Белла

Интересно, что на вопрос о существовании скрытых параметров ответ был дан. Ответ был дан экспериментальный, в шестидесятых годах двадцатого века. Белл вывел ряд неравенств, которые не могут выполняться ни в одной теории с полной предопределенностью, полностью детерминистической. Мы не знаем, как эта теория выглядит, но как бы она ни выглядела, эти неравенства нарушаться не должны. Быстро померили, увидели, что в жизни они нарушаются и, таким образом, скрытых параметров не существует. Вот экспериментальная проверка неравенств Белла, это конец шестидесятых годов двадцатого века, это есть окончание процесса появления квантовой физики на мировой сцене. , таким образом, примерно семьдесят лет заняло.

Соотношение классической и квантовой физики

Как друг с другом соотносятся классическая и квантовая физика. Ключевым словосочетанием здесь являются слова - принцип соответствия. В области, где применима и классическая, и квантовая теория, обе должны давать один и тот же результат. Что «в той области»? В каком случае? Ответ на эти вопросы индивидуален для каждой задачи. Но общий рецепт состоит в том, что надо сравнить характерную величину действия, которая в системе есть, с постоянной Планка, которая имеет размерность действия. Если характерное действие в системе, пусть энергия умноженная на время, если характерная величина действия сильно превышает постоянную Планка, то система, скорее всего, ведет себя классическим образом, и классическая физика применима. Это позволяет разгадать простой фокус с выводом формулы Рэлея-Джинса, что написано про малость постоянной Планка и означает простую математическую процедуру. Берем квантовую формулу, устремляем величину $\hbar$ к нулю. Это и сделано в формуле Планка. Посмотрим экспоненту - надо разложить в ряд Тейлора. Если $\hbar$ - это законная процедура, то нулевой член разложения, единица уйдет с единицей, которая вычитается и останется первый порядок. $\hbar\omega$ делить на kT , $\hbar\omega$ сократится с числителем, постоянная Планка выпадает, как и положено для классической формулы. Зато вместо нее kT в числителе оказывается.

Исходно Планком была введена величина, которую и он, и мы обозначаем как h . Эта величина отличается на 2π . Там общее правило такое, что h надо умножать на ω , а h надо умножать на ν - частоту простую. С этим же связано множество казусов в определении того, что стоит в левой части формулы Планка. Полное излучение это есть

$$\int_0^\infty I(\omega) d\omega$$

если писать в терминах не ω , а ν нужно переопределить и ввести величину дифференциал, то ω от дифференциала $d\nu$ отличается фактором 2π ,

$$\int_0^\infty I(\nu) d\nu$$

если мы хотим написать формулу Планка в терминах обычной частоты, то не достаточно заменить ω на $2\pi\nu$ и тут, соответственно, надо не забыть про 2π тогда получится правильно. По этой причине иногда формула в учебнике отличается от того, что здесь написано.

Атомная система единиц. Фундаментальные константы

В первую очередь будем говорить о свойствах атомов и близких к ним по размеру и по характерным энергетическим масштабам объектов. Использовать систему единиц, разработанную для описания нашего макроскопического мира, в этом случае становится ужасно неудобно. В человеческое сознание плохо влезают величины, содержащие больше чем шесть нулей. И когда говорят, что вот тут частота 10^{14} , тут 10^{16} , то конечно понять, что это такое на самом деле тяжело, поэтому для описания атомной физики, для описания каких-то субатомных по шкале масштабов процессов естественно необходимо ввести какую-то систему единиц, в которой этой неприятности не будет. Иногда постоянную Планка пишут вместо $\hbar^2$ $\hbar^{-2}$ или наоборот $\hbar$ это 10^{-27} , поэтому $\hbar^2$ вместо $\hbar^{-2}$ это 104 порядка лишних, физикам сразу хочется, что-то сделать с лишним порядком. Поэтому если считать в атомной системе единиц, то конечно хотя бы таких казусов не будет.

Итак, *атомная система единиц* - это так называемые естественные системы единиц, в которой в качестве опорных точек, в качестве эталонов введены не какие-то придуманные нами рэперы, как килограмм, а природные константы. Атомная система единиц сделана на трех величинах, как и «СГС», например, три величины надо определить - что такое сантиметр, грамм и секунда? Больше ничего не надо, остальное выражается через них. Тут тоже три величины, но это три фундаментальные константы — заряд электрона, постоянная Планка и масса электрона. $\hbar = 10^{-27}$ эрг*с масса электрона — это примерно то же самое, $m = 9 \cdot 10^{-28}$ грамм, а заряд электрона $e = 4,8 \cdot 10^{-10}$, теперь единицы измерения зарядов «СГС»

$$\text{эрг} = \frac{\text{гсм}^2}{\text{с}^2} = 10^{-7} \text{ Дж}$$

Итак, три величины, остальные делаются из них. Есть ещё две константы, которые хорошо знать для того чтобы с атомной системой единиц работать. Это величина скорости света и величина массы ядра. Все называют отношение масс нуклона и

электрона, который действительно порядка 2000, забывая, что в типичном атоме в ядре нуклонов много. Характерный атом из середины таблицы Менделеева, у него атомный номер, условно говоря, 20 и нейтронов больше чем протонов. А поэтому как минимум раз на 50 надо эти две тысячи умножить, значит, масса ядра $\text{ядра} = 10^5$ массы электрона. Скорость света через атомную единицу скорости

$$c = \alpha^{-1} V_{\text{атомная}} \text{ атомных масштабов скорости} \quad V_{\text{атомная}} = \frac{e^2}{\hbar} \quad \alpha \approx \frac{1}{137}$$

Никаких других характерных безразмерных величин в атомном мире нет. Разумеется, если мы уходим вглубь на уровень того, что делать с ядром или если мы наоборот поднимаемся на масштабы, существенно превышающие атомные, возникнут другие величины. Но, в общем, все будет крутиться на шкале масштабов в атомной и использование естественной атомной системы единиц крайне желательно. Атомный масштаб длины, так называемый радиус Бора.

$$a_0 = \frac{\hbar}{me^2} \approx 5 \cdot 10^{-9} \text{ см}$$

Атомный масштаб, энергии специального общепринятого обозначения тоже нет, но это два ридберга

$$2Rd = \frac{me^4}{\hbar} = 27 \text{ eV} \approx 3 \cdot 10^5 \text{ K}$$

Переведем в градусы Кельвина, один электрон вольт - это примерно 11000° K , соответственно, примерно $3 \cdot 10^5 \text{ K}$. Если умножить на постоянную Больцмана и выразить температуру в энергетических единицах, то примерно $3 \cdot 10^5 \text{ K}$.

Кое-что мы уже знаем о комнатной температуре на атомном масштабе, это маленькая величина. Характерные энергии, которые нас окружают малы и это неудивительно, если вспомнить в задачах про нагретые тела для того чтобы на оптических частотах начать излучать, тело надо нагреть и нагреть прилично, желательно до нескольких тысяч градусов Цельсия или Кельвина, что то же самое на этом масштабе, тогда пойдут оптические фотоны. А оптические фотоны - это один, два, три электронвольта.

Лекция 2. Корпускулярные и волновые свойства света

История физики. Энергия и импульс релятивистских частиц. Эффект Комптона

Ранее говорилось про совокупность экспериментов, которые очень явным, но косвенным образом свидетельствуют о том, что свет в некоторых экспериментах ведет себя как набор частиц. В некотором смысле окончательная точка была поставлена в 1923 году в опытах Комптона, который показал напрямую, что фотон — это частица, обладающая импульсом и энергией. Надо вспомнить немного релятивистской механики, нужна именно связь для частицы, имеющей массу покоя $m = 0$ и заданный импульс ее энергии.

$$E = \sqrt{(m_0 c^2)^2 + p^2 c^2}$$

Построим график

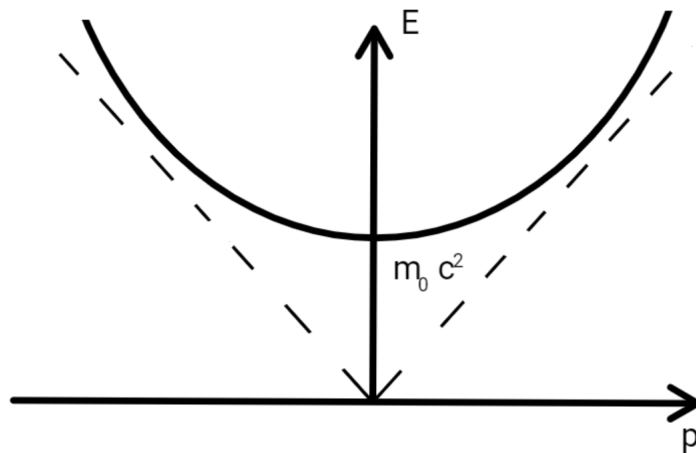


Рис. 2.1. График частицы, имеющей массу покоя $m = 0$ и заданный импульс ее энергии

Одна ось — импульс, вторая — энергия. Начинается все как парабола, растущая из $m_0 c^2$, с классической асимптотикой $p^2/2m$ и она выходит на линейный закон в ультрарелятивистском режиме, когда про этот член $(m_0 c^2)^2$ можно забыть. Фотоны, как было понятно уже в начале века, это частицы с нулевой массой покоя, их нельзя остановить, у них закон дисперсии полностью линейный.

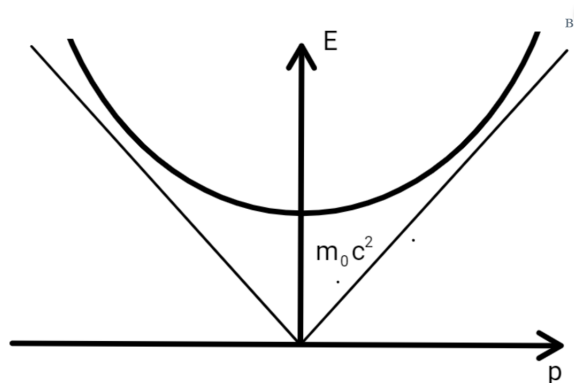


Рис. 2.2. График фотона с полностью линейной дисперсией

Для фотона

$$E = p * c$$

Энергию фотона мы знаем из работ Эйнштейна, из работ Планка E это $\hbar\omega$, таким образом, импульс фотона $p = \frac{\hbar\omega}{c}$, где c — это скорость света. Эффект Комптона, это рассеяние электромагнитного излучения. В случае Комптона это было рентгеновское излучение, значит рентгеновский или гамма диапазон на электроне. Электрон можно считать покоящимся (электроны никак не разогнанные), летит свет и выясняется, что после того как свет проходит через вещество, где есть электроны: во-первых, он отклоняется, во-вторых, частота сдвигается в красную сторону. На корпускулярном языке фотоны теряют энергию.

С точки зрения классики — абсолютно то же непонятное явление. Классическая электромагнитная волна может поменять частоту, для этого надо чтобы был эффект Доплера. Но если попробовать прикинуть какие есть электронные скорости, какая величина эффекта Доплера, окажется, что она много, много порядков не дотягивает до того, что в эксперименте есть. А в квантовой, в корпускулярной картине все просто — частица фотон рассеивается на частице электрона, электрон куда-то улетает.

Электрон куда-то улетает, унося с собой часть импульса и часть энергии. Соответственно то, что осталось, остается в качестве уменьшенной энергии. Выясняется, что кинематика, фактически выписанных наверху формул законов сохранения энергии и импульса, достаточно, чтобы получить простую формулу, которая описывает эффект Комптона. Эти законы сохранения. Допустим, электрон в первый момент времени покоился до рассеяния. Таким образом, произойдет изменение импульса фотона.

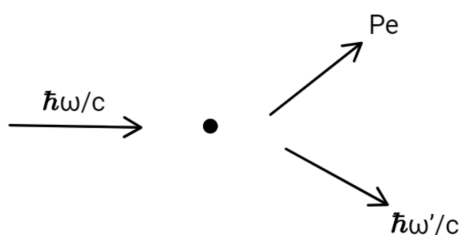


Рис. 2.3. Электрон, через который проходит свет

$$p = \frac{\hbar\omega}{c}$$

$$p = \frac{\hbar\omega'}{c} \quad p_e$$

$$\vec{p} - \vec{p}' = \vec{p}_e$$

Чтобы избавиться от векторов, возведем обе части этого уравнения в квадрат.

$$p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \Theta = p_e^2$$

перепишем через частоты, подставив $p = \frac{\hbar\omega}{c}$

$$\omega^2 + \omega'^2 - 2\omega\omega' \cos \Theta = p_e^2 \frac{c^2}{\hbar^2} \text{ - уравнение №1 закон сохранения импульса}$$

Закон сохранения энергии. $\hbar\omega - \hbar\omega'$ - это изменение энергии фотона, оно должно быть равно изменению энергии электрона. То, что относится к электрону, с целью последующего возведения в квадрат, раскидаем по частям уравнения так:

$$\hbar\omega - \hbar\omega' + m_0c^2 = \sqrt{(m_0c^2)^2 + p_e^2c^2}$$

Возводим в квадрат и делим на постоянную Планка. Слева получится много членов, выпишем все:

$$\omega^2 + \omega'^2 + \frac{m_0^2c^4}{\hbar^2} - 2\omega\omega' + 2\omega\frac{m_0c^2}{\hbar} - 2\omega'\frac{m_0c^2}{\hbar} = \frac{m_0^2c^4}{\hbar^2} + \frac{p_e^2c^2}{\hbar^2}$$

Сокращаем

$$\omega^2 + \omega'^2 - 2\omega\omega' + 2\omega\frac{m_0c^2}{\hbar} + 2\omega'\frac{m_0c^2}{\hbar} = + \frac{p_e^2c^2}{\hbar^2}$$

Уравнение №1 — следствие закона сохранения энергии

Видно, что они похожи, их можно вычесть друг из друга. Из более длинного вычтем более короткое. Квадраты частот уйдут, $\frac{p_e^2 c^2}{\hbar^2}$ уйдет. Часть оставшегося слагаемого первого уравнения, и часть оставшегося слагаемого второго уравнения, это почти одно и то же, только разница в косинусе. Таким образом, остаются фактически три слагаемых (два слагаемых сразу перенесем направо и сгруппируем)

$$2\omega\omega'(1 - \cos\Theta) = 2(\omega - \omega')\frac{m_0c^2}{\hbar}$$

Это фактически уже то, что надо — простое уравнение, описывающее изменения частоты фотона, как функцию угла, на который этот фотон рассеялся. Запишем это уравнение не в частотах, а в принятых терминах длины волны, это обратная частоте величина. Делим обе части на $\omega\omega'$, двойки уходят и делим на минус.

$$(1 - \cos\Theta)\frac{\hbar}{m_0c^2} = \frac{1}{\omega'} - \frac{1}{\omega}$$

Мы знаем, что ω' меньше чем ω , поэтому вычитаем из $\frac{1}{\omega'}$. Длина волны

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

Умножаем уравнение на $2\pi c$, получается

$$\frac{2\pi c\hbar}{m_0c^2}(1 - \cos\Theta) = \lambda' - \lambda$$

Изменение длины волны, длина волны меняется в сторону увеличения. Это единица минус косинус угла, на который электрон рассеялся, умножить на константу с размерностью длины, которая называется - *комптоновская длина волны*.

$$\frac{2\pi c\hbar}{m_0c^2}(1 - \cos\Theta) = \lambda_{\text{компт}}$$

Это соотношение блестяще подтверждается в эксперименте. Таким образом, при рассеянии на неподвижных частицах, в данном случае на электронах, свет в чистом виде ведет себя как поток корпускул. В физике микромира встречаются разные масштабы с размерностью длины. Мы хорошо знакомы с атомной длиной a_0 с радиусом Бора. Все масштабы с размерностью длины как-то друг с другом связаны. Для того чтобы из одного из них получить другой надо умножить его на некую безразмерную константу, и в данном случае это безразмерная константа является постоянной тонкой структуры. На самом деле фундаментальная безразмерная константа, которая

фактически единственная. Ну и 2π еще из-за того, что $\lambda \cdot 2\pi$ умножить на λ , это будет коэффициент между a_0 и $\lambda_{\text{компт}}$. Таким образом, комптоновская длина волны маленькая на атомных масштабах, становится понятно, почему все это хорошо видно на рентгене в гамма диапазоне, надо чтобы λ' и $\lambda_{\text{компт}}$ были сравнимы.

Волновые свойства света. Опыт Юнга-Френеля

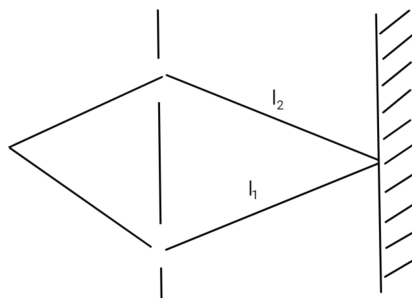


Рис. 2.4. Опыт Юнга и Френеля, где $\ell_1 = \ell_2$

Мы убеждены, что свет ведёт себя, по крайней мере, в некоторых случаях, как поток частиц. В то же время с конца 18 - начала 19 века хорошо известно, что свет проявляет и волновые свойства тоже.

Опыт Юнга и Френеля. Рассеяние на двух щелях — источник света ставится перед экраном, в котором сделаны две щели. После этих щелей ставится экран и смотрим картинку, которая наблюдается на экране. Если бы свет являлся в чистом виде потоком частиц, мы бы увидели две ярких белых полосы, соответствующих прохождению света напрямую, через эти щели. На самом деле в этом опыте хорошо видна волновая природа света. Конструкция с двумя щелями сделана для того, чтобы два источника света были друг на друга похожи. Одна и та же волна, излученная заданным источником достигает обеих щелей, каждый из них становится источником вторичных волн. Эти волны друг с другом интерферируют, потому что эти волны имеют определенную относительную фазу относительно друг друга. Если одно и то же расстояние эти две волны проходят, напомним ℓ_1 и ℓ_2 , если ℓ_1 и ℓ_2 равны, то волны складываются конструктивно, у них одна и та же фаза.

Если же ℓ_2 не равно ℓ_1 , то волны друг друга гасят - *деструктивная интерференция*. Дальше еще λ и опять конструктивная на период отличается.

Для того, чтобы этот опыт поставить надо использовать монохроматический источник света, чтоб величина λ была нормально определена. Это можно сделать, например, пропустив солнечный свет через фильтр. Дальше ставится экран с двумя

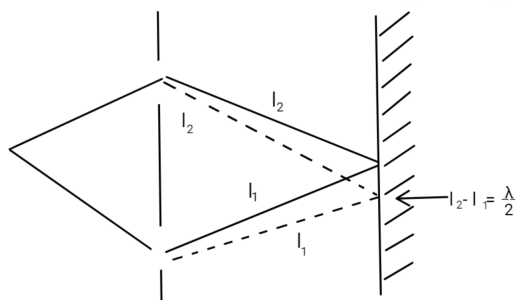


Рис. 2.5. Опыт Юнга и Френеля, где $\ell_1 \neq \ell_2$

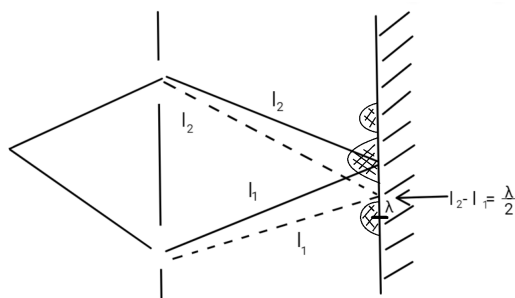


Рис. 2.6. Дифракционная картина, состоящая из темных и светлых полос

щелями и следующий экран, на котором все это видно. Двести лет назад это можно было сделать, и было сделано. Опыт, который доказал, что свет является волной. В этом, частично верном, убеждении, наука находилась следующие примерно сто лет.

Опыт Винера. Стоячие волны

Второй опыт, поставленный позже по экспериментальным причинам. Надо было, чтоб появились фотопластинки. Это опыт Винера, примерно 1880 год. Винер доказал, что свет может образовывать стоячую волну и свойства этой стоячей волны регистрируется на фотопластинке. Значит берем зеркало и направляем в него луч света. Он отражается. Суперпозиция бегущей налево и бегущей направо волн, заданной фазы относительно между ними (фаза задается точкой, где расположено зеркало), приводит к тому, что появляется стоячая волна.

На такой волне есть пучность и есть узлы. То же самое получается на веревке, если ее привязать к стене и пустить на ней пустить. Если дергать по синусу, то на ней появится волна, на которой тоже будут узлы и пучности. Винер сумел эти узлы и пучности сфотографировать и увидеть. Сложность техническая очевидна. Длина волны видимого света меньше микрона, а еще надо на пополам разделить, чтобы период стоячей волны увидеть. Сделать такую фотопластинку в те времена было

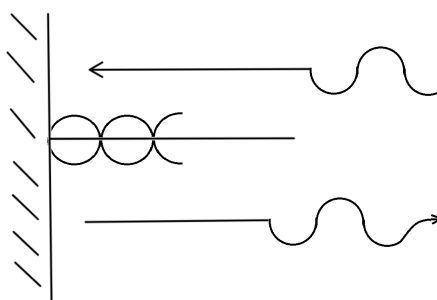


Рис. 2.7. Опыт Винера

тяжело. Но даже если на ней что-то и зафиксорируется, с периодом несколько сотен нанометров, то это что-то потом тяжело увидеть. Винер нашел простой выход. Он взял тоненькую фотопластинку и под маленьким углом к зеркалу поставил. Тогда

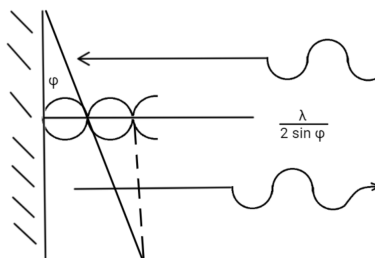


Рис. 2.8. Опыт Винера

легко видеть, что два периода стоячей волны на большом куске фотопластинки. Соответственно, период картинки, которая на фотографии видна, это и есть период стоячей волны

$$\frac{\lambda}{2 \sin \varphi}$$

Если φ сделать достаточно маленьким, то период этой сфотографированной картины оказывается уже несколько микрон. Это то, что можно увидеть в микроскоп и это то, что было сделано. Чем интересен опыт Винера? Через много лет после Юнга и Френеля это интересно тем, что мы помним, что красная граница есть у работы Эйнштейна, конечно у фотоматериалов тоже красная граница. Химические процессы, активируемые светом, так же, как и фотоэффект. Некая конечная энергия поглощенного фотона должна быть. На пленку можно фотографировать видимый свет, а инфракрасный фотографировать нельзя. Таким образом, процесс фиксации изображения в этом эксперименте проявляет абсолютно квантовые черты. Всегда, когда фиксируется свет, это всегда квантовый процесс. Абсолютно классическая при

этом волновая картинка возникновения интерференции в стоячей волне, это фиксируется. В одном и том же эксперименте и квантовые, и классические свойства. Дело именно в том, что в одних и тех же экспериментах свет ведет себя и классическим, и квантовым образом.

Копенгагенская интерпретация квантовой теории (вероятностный характер квантовой теории). Многомировая интерпретация квантовой теории

Рассмотрим следующий мысленный эксперимент. Возьмем источник света. Запустим этот свет на полупрозрачное зеркало. Свет идет или вниз, или направо с вероятностью $\frac{1}{2}$. Ставим фотодетекторы в одном плече и в другом плече.

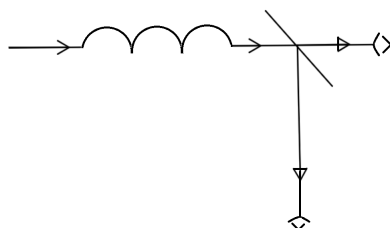


Рис. 2.9. Источник света запущенный на полупрозрачное зеркало

Поставив достаточное количество фильтров, делаем входящий поток очень слабым, так чтобы изредка только фотодетекторы срабатывали. Вопрос срабатывания фотодетектора, это вопрос детектирования одного фотона. В этом процессе свет ведет себя как поток корпускул, как поток частиц. Поэтому щелкает или один детектор, или другой детектор. Не бывает так, что один и тот же фотон одновременно пошел и в верхний и в нижний канал и два фотодетектора сработали наполовину. Значит щелчок есть либо в одном детекторе, либо в другом. Как условились поток у фотонов редкий, поэтому щелчки редкие, случайными совпадениями можно пренебречь. Пока может быть необычно, но никакого парадокса не видно.

Дальше рассмотрим другой опыт с таким же началом. Свет, полупрозрачное зеркало, далее ставим два зеркала уже глухих стопроцентных и сводим эти два луча на экране.

Такой опыт легко поставить. На экране будет наблюдаться интерференционная картинка. Положение максимумов и минимумов в ней, как в опытах Юнга и Френеля, будет определяться разностью хода в одном и в другом плече. Как не уменьшать

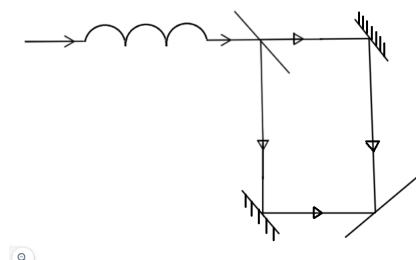


Рис. 2.10. Источник света запущенный на полупрозрачное зеркало и далее на два глухих зеркала

интенсивность входного пучка, интерференционная картинка не смажется. Она будет бледнеть по мере того, как количество света будет уменьшаться, но форма будет оставаться такой же. Как бы мало света тут проходить не будет, останется интерференционная картинка. Она вызвана тем, что волна (это классический волновой эффект) разделяется на две части, они проходят по двум путям и складываются конструктивно или деструктивно на экране. Здесь появляется парадокс. Слабый свет во второй схеме, волна разделяется на две части. В первой схеме фотон идет или вверх, или вниз. Вопрос следует сформулировать следующим образом: «В какой момент фотон решает — идти ему в верхний или в нижний канал. В какой момент происходит этот выбор?». В тот момент как он рассеивается на этом зеркале (Рис 2.9) отражается, не отражается, тогда этот выбор и происходит. Но этот ответ, очевидно, не правильный. Во второй схеме точно такое же зеркало, но никакого выбора нет. Волна идет одновременно и налево, и направо. Приходится заключить, что выбор реализации пути для данного фотона происходит в момент, когда щелкает детектор в момент измерения.

Ситуация носит общий характер. Многие эксперименты в квантовом мире носят принципиально вероятностный характер. Выбор одного из возможных исходов происходит в момент измерения, в момент срабатывания, как говорят, классического измерительного прибора. Это простейшее изложение того, что называется *Копенгагенской интерпретацией квантовой теории* — выбор в момент измерения. После этого никаких внутренних противоречий нет, но принять такую картинку психологически очень тяжело. Дело в том, что от момента кажущегося выбора, до момента измерения может пройти много времени, установка может быть разнесена в пространстве, наконец, много всяких событий может произойти за время характерное для эксперимента. Значит все это время во всем пространстве для многих событий мы должны удерживать в голове вероятностную картину. Решив, что какая-то из вероятностей реализуется только тогда, когда мы померили. Знаменитый парадокс с котом Шредингера.

Кот помещается в изолированный ящик, где у него есть воздух, есть еда, есть ампула с ядом. Ампула с ядом в зависимости от того какой сработал детектор или разбивается, или не разбивается, кот или умирает, или не умирает. Вопрос: «В какой момент выясняется, разбилась ли ампула, умер ли кот?». С точки зрения Копенгагенской интерпретации — только, когда мы открыли ящик. А до этого кот был наполовину живой, наполовину мертвый. В такой канонической интерпретации так и есть. Надо ждать до того момента, как мы померяем. Таким образом, тот факт, что фотоны в эксперименте могут вести себя по-разному, могут в очень близких экспериментальных схемах проявлять себя и как поток частиц, и как волна, заставляет задуматься над интерпретацией того, что происходит в квантовом мире. Заставляет думать о том, когда происходит выбор. Копенгагенская интерпретация квантовой теории является наиболее общепринятой. Но есть и другие.

Есть так называемая *многомировая интерпретация квантовой теории*, говорящая о том, что наша вселенная в каждый миг клонируется, как происходит какое-то квантовое измерение. Например, в наших схемах, вселенная разделяется на две копии. В одной из копий фотон пошел по верхнему каналу, в другой из копий фотон пошел по нижнему каналу. В какой из копий оказались бы мы, это уже дело случая. А где-то рядом значит есть другая вселенная, где другой экспериментатор неотличимый от нас обнаружил другой исход эксперимента. Не размножайте сущности без необходимости - философский принцип. Вот тут нарушение его происходит грубейшим образом, непрерывно копии вселенной генерируются. Но зато утешительный, в некоторых случаях, принцип, потому что он говорит, что где-то есть вселенная, где все по-другому сложилось.

Волновая функция. Стационарный случай

Надо померить понятие света как волны и понятие света как потока частиц. Бросающаяся в глаза разница между волной и потоком частиц состоит в том, что волна в пространстве делокализована e^{ikx} и $\cos kx$ распространено по всему пространству, а частица в пространстве локализована, у нее есть определенная координата. Эта разница является самой несущественной и самой устранимой. Устраняется она посредством введения понятия волнового пакета. Начнем с плоской волны

$$E(x, t) = E e^{i(kx - \omega_k t)}$$

На самом деле электрическое поле, это действительная величина, поэтому записывая такого рода формулы, мы подразумеваем все время, что надо взять действительную часть от комплекта, экспонента получится косинус, но так гораздо проще для записи.

Принципиальным шагом для того, чтобы сделать что-то ограниченное в пространстве из плоских волн, является утверждение о выполнении принципа суперпозиции. Если какие-либо две функции являются решениями уравнений Максвелла,

тогда сумма этих функций с любыми коэффициентами это решение уравнений Максвелла. Таким образом, если

$$E(x, t) = E e^{i(kx - \omega_k t)}$$

— это некое состояние электромагнитного поля, то состоянием электромагнитного поля будет являться и сумма таких плоских волн, каждая из которых имеет свой волновой вектор k и зависящую от него частоту $\omega_k t$.

$$E(x, t) = \sum_k E e^{i(kx - \omega_k t)}$$

где k - это совершенно произвольный ряд значений, E_k - совершенно произвольная амплитуда. От суммы до интеграла недалеко. Опишем интеграл Фурье

$$E(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int E_k e^{i(kx - \omega_k t)} dk$$

по причинам, которые сейчас не очень интересны, пишем $\frac{1}{2\pi}$. Это написано для простоты формулы для одномерного случая. Если настоящее трехмерное пространство d^3k , то k становится вектором $\frac{1}{2\pi^3}$. Во всех этих уравнениях $\omega_k = |k|c$ - модуль k умноженный на скорость света. Надо задаться какой-то формой E_k и увидеть, что при хорошем выборе зависимости E от k получается нечто ограниченное в пространстве.

Возьмем

$$E_k = E_{k0} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\delta k^2}}$$

— это колоколообразная экспонента.

Нарисуем график. На одной оси k , есть какая-то k_0 , на второй оси E_k . Гауссов колокольчик с полушириной δk_0 . Чтобы сделать формулы покороче, рассмотрим случай

$$t = 0$$
$$E(x) = \frac{E_{k0}}{2\pi} \int e^{ikx - \frac{(k-k_0)^2}{2\delta k^2}} dk$$

E_{k0} вынесли за знак интеграла. Это Гауссов интеграл. В экспоненте стоит полином от переменной интегрирования и это полином второго порядка. Такие интегралы берутся однотипно собиранием полного квадрата в показателе.

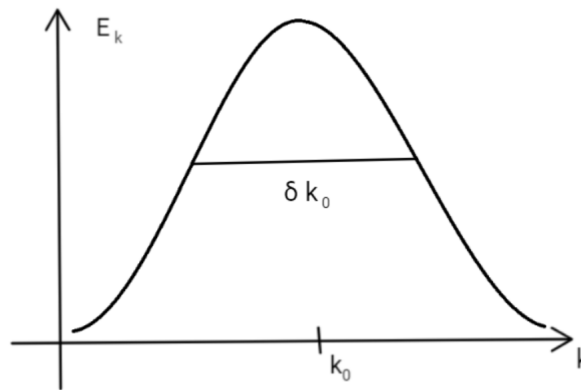


Рис. 2.11. Гауссов колокольчик

$$E(x) = \frac{E_{k0}}{2\pi} \int e^{i(k-k_0)x - \frac{(k-k_0)^2}{2\delta k^2} + ik_0x} dk = \frac{E_{k0}}{2\pi} \int e^{-\frac{1}{2}(\frac{k-k_0}{\delta k} + ix\delta k)^2 - \frac{x^2\delta k^2}{2} - ik_0x} dk$$

Подготовили то, что нужно для полного квадрата $(k - k_0)^2$ умножить на некий множитель, перекрестный член $(k - k_0)x$, до полного квадрата не хватает x^2 с неким множителем, значит x^2 надо домножить на $2\delta k^2$ и надо i еще посчитать, чтобы минус правильно получить.

Теперь легко взять этот интеграл по dk . Для этого делаем замену того, что стоит под квадратом за новую переменную интегрирования, δk выскочит перед интегралом, что неважно, а все что вне этой скобки к интегрированию отношения не имеет. Таким образом, то почему надо интегрировать не содержит x , переменной, которая действительно нужна, а то, что исключает, просто выносится за знак интеграла. По этому поводу не будем точно вычислять коэффициент.

$$E(x) = \frac{E_{k0}}{2\pi} \int e^{i(k-k_0)x - \frac{(k-k_0)^2}{2\delta k^2} + ik_0x} dk = \frac{E_{k0}}{2\pi} \int e^{-\frac{1}{2}(\frac{k-k_0}{\delta k} + ix\delta k)^2 - \frac{x^2\delta k^2}{2} - ik_0x} dk = \alpha$$

$$E_{k0}\delta k * e^{\frac{-x^2\delta k^2}{2} - ik_0x}$$

Нарисуем график, того, что получилось. Гауссов колокольчик, нарисуем его сверху и снизу от горизонтальной оси, набитый синусом. И какие-то осцилляции с волновым вектором k_0 внутри. Центр колокольчика это $x = 0$, все это в момент времени равное нулю.

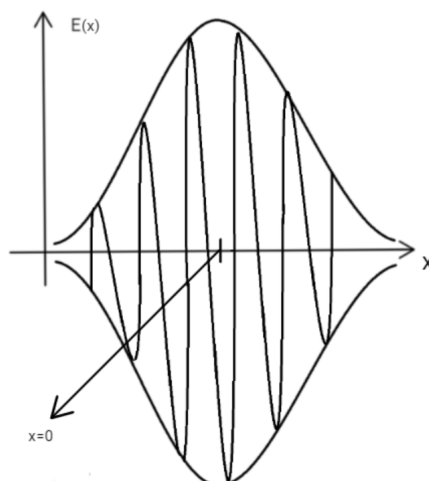


Рис. 2.12. Гауссов колокольчик набитый синусом

Получили то, что хотели, вспомнив про принцип суперпозиции, сделав, как принято говорить, волновой пакет. Набор из плоских волн с волновыми векторами всеми в окрестности некоего k_0 , но все-таки не совпадающими в точности с k_0 , сделали нечто ограниченное в пространстве. Волновой пакет не является плоской волной. Плоская волна по определению, это e^{ikx} , у нее один волновой вектор и одна частота. У волнового пакета совокупность волновых векторов и частот, но все они лежат по возможности вблизи k_0 . δk_0 - разброс волновых векторов, которые этот пакет составляют. $\frac{1}{\delta k_0}$ - разброс в реальном пространстве.

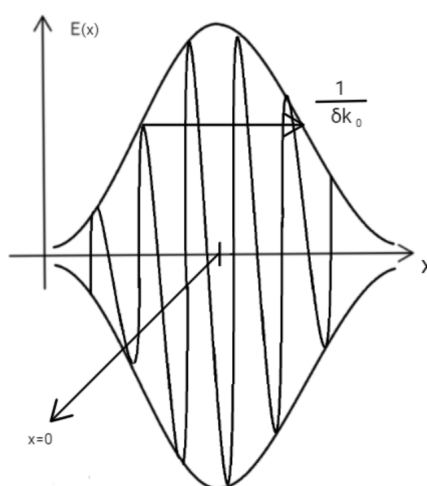


Рис. 2.13. Соотношение неопределенности

Соотношение неопределенности Гейзенберга

Чем лучше мы локализовали в пространстве волновых чисел волновой пакет, тем хуже он локализован в пространстве координат, и наоборот. Если мы хотим хорошей определенности для координаты волнового пакета, мы вынуждены проигрывать в том, насколько хорошо определено волновое число этого пакета. Перед нами первый пример того, что в квантовой физике называется *соотношение неопределенностей*. Соотношения неопределенностей возникают для объектов, имеющих волновую природу.

В квантовой физике волновую природу имеют все объекты. И фактически показывают с точки зрения математики ровно то, что обсуждали выше. Невозможно сделать волновой пакет, одновременно сколько угодно хорошо определенный в пространстве координат и в пространстве волновых чисел. $\delta x * \delta k$ в нашем случае равен единице. Можно испортить локализацию в пространстве δx , не улучшив ее в пространстве δk . Самое простое, что можно сделать, это взять два волновых пакета рядом расположенные, дельта x - это, условно, расстояние между ними, δk - какое брали для каждого из них, такое и осталось. Значит $\delta x * \delta k \geq 1$

Как сделать что-нибудь более квантовомеханическое из этого неравенства? Надо ввести постоянную Планка в рассмотрение. $\delta x * \delta p \geq \hbar$ Простейший вид соотношения неопределенности Гейзенберга. Чтобы связь k и p вывести в случае фотона надо вспомнить, что такое p .

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

Нестационарный случай. Выводы. Заключение

Это все было сделано в момент времени $t = 0$, что произойдет, если теперь в произвольный момент времени это рассмотреть. Будет примерно то же самое. Если $t \neq 0$, то в формулах нужно x заменить на $x - ct$, наш волновой пакет со скоростью света летит вдоль оси x . Не меняя своей формы. Это следствие линейности закона дисперсии, простой формулы, связывающей $\omega k t$ и k через коэффициент пропорциональности, который равен скорости света. Если мы запустили волновой пакет двигаться, то можно организовать аналоги соотношения неопределенностей, включающие время. Например, время, за которое волновой пакет проходит заданную точку. Это δx данного волнового пакета, делить на скорость, с которой он движется, делить на c .

$$\frac{\delta x}{c} * c \delta p \geq \hbar$$

$\frac{\delta x}{c}$ - это время, $c * p$ - это энергия волнового пакета, δp это неопределенность энергии. $\delta t * \delta E \geq \hbar$ Если мы хорошо знаем энергию фотона, то мы не можем хорошо знать момент времени, когда детектор сработает, этот фотон зафиксировав. Если мы точно знаем время, когда сработал детектор, значит мы потеряли знание энергии. Примирить полную делокализацию волн и локализацию частицы в пространстве можно, введя понятие волнового пакета. Но после этого неизбежно появляется понятие принципа неопределенности — невозможность одновременной локализации в волновых числах и в координатах сколь угодно большой точностью. Вследствие волновой природы, в данном случае, электромагнитного поля. Просто математическим умножением на постоянную Планка можно переписать полученные простейшие соотношения неопределенности и на такие термины, имеющие отношения к фотонам как частицам заданной энергией $\hbar\omega$ и с заданным импульсом. Переходим к электронам, к структуре материи.

Модели атомов. Модель атома Томсона. Опыт Резерфорда. Модель атома Резерфорда

Годы, предшествующие первой мировой войне. Англия, лаборатория Резерфорда, где проводились исследования свойств вещества.

В начале 20 века в распоряжении исследователей появились новые инструменты, позволяющие не напрямую, но с высокой степенью понимания того, что происходит, исследовать свойства материи. И начали проверять в первую очередь гипотезы о том, как устроены атомы. Что вещество сделано из атомов к этому времени уже никто не сомневался. Но из чего сделаны атомы, как они устроены? Все, что тогда люди про атомы знали, это то, что в них есть электроны. Потому что электрические явления были хорошо исследованы. И кроме этого, что у атомов есть некоторый определенный размер, это тривиальное утверждение. Главенствующей являлась модель Томсона, имеющая жаргонное название: «Пудинг с изюмом». Считалось, что атом — это некий рыхлый положительный остов определенного размера, в который вкраплены изюминки электрона, неподвижно расположенные внутри этого положительного фона.

Модель Томсона в рамках классической физики сама по себе непротиворечива. Не было утверждения, что все это держится только за счет электростатических сил. Положительный фон, который держится неизвестно за счет чего, и вообще является неизвестно чем, и имплантируются туда, это электроны. Строенная физическая картина разбилась об эксперимент. В опытах Резерфорда в вакууме на тонкую золотую фольгу налетал поток α -частиц.

α -частицы ядра гелия. Достаточно тяжелая вещь α -частица — два протона и два

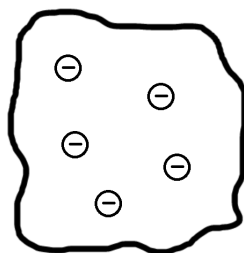


Рис. 2.14. Модель Томсона «Пудинг с изюмом»

нейтрона, в совокупности примерно 104 массы электрона. На электронах α -частица рассеиваться не может, она должна рассеивается на чем-то сравнимой массы. Был поставлен экран с люминофором. И исследовался вопрос о том, как выглядит статистика рассеяния α -частиц по углам. Выяснилась следующая картина. Большая часть α -частиц не рассеивалась вообще, как летела, так и пролетала в центр экрана. Но, иногда, α -частицы рассеивались на большие углы. Картинка выглядит так, как буд-

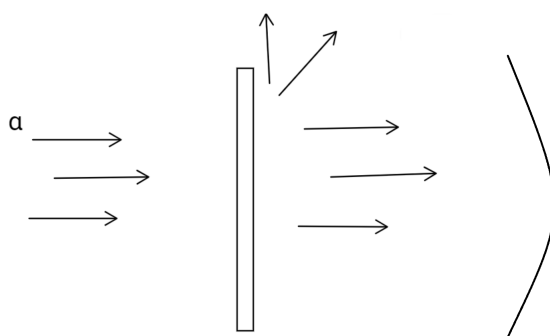


Рис. 2.15. Модель Резерфорда

то в большей части объема этой золотой пленки вообще ничего для α -частицы нет. Она летит, может быть, через электроны, которые легкие, которые она не замечает, а иногда α -частица встречает что-то очень тяжелое и на этом тяжелом рассеивается. Резерфорд выполнил расчеты, проанализировав то, как выглядит диаграмма рассеяния на этом чем-то тяжелом, и выяснил, что рассеяние выглядит так, будто рассеивающие центры заряжены положительно, так что α -частицы от них отталкиваются, имеют вид практически точечных зарядов. Резерфорд не смог определить в точности размер этого чего-то, что рассеивает, но выяснил, что это, как минимум, в три тысячи раз меньше, чем атом, по размерам. Никак с моделью Томсона эта картина не согласовывалась. Модель Томсона должна была бы равномерно задерживать, может быть рассеивать все α -частицы. Результаты эксперимента лаборатории Резерфорда заставили его предположить совершенно другую картину, когда у атома есть

массивное положительно заряженное ядро, окружённое облаком электронов. Ничего

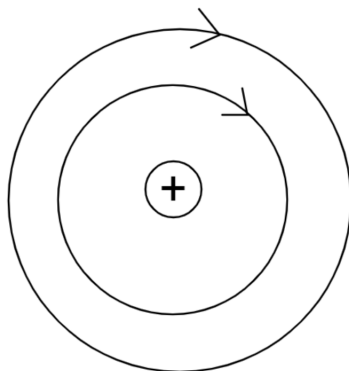


Рис. 2.16. Модель-предположение Резерфорда

тогда не знали, что с электронами делается.

Резерфорд просто написал, что модель атома, состоящая в том, что есть маленькое положительно заряженное ядро и вокруг его каким-то образом, вероятно, движутся электроны (если бы они не двигались, то попадали бы на ядро) находится в соответствии с результатами его экспериментов. По опытам Резерфорда было написано несколько статей с экспериментальными результатами, Резерфорда в авторах нет. Хотя это было сделано в его лаборатории, но тогда были другие стандарты того, кто должен, и кто не должен быть авторами статей. Ту статью выпустили только те люди, которые непосредственно мерили, а вот интерпретацию расчетов Резерфорд уже опубликовал годом или двумя позже. Что же вообще с этими электронами может происходить? По-видимому, они должны обращаться вокруг ядра, должно быть что-то типа планетарной системы. Но, быстро стало ясно, что такая планетарная модель атома в рамках классической физики жить не может. Электроны заряжены, движущийся заряд обязан испускать электромагнитные волны. Раз он испускает электромагнитные волны, значит он теряет энергию, если он теряет энергию он должен падать на ядро.

Можно произвести расчеты в рамках классической физики и увидеть, что упасть на ядро он должен очень и очень быстро. Формально говоря, в солнечной системе планеты тоже испускают гравитационные волны, тоже падают на солнце. Но тут оценки дают наоборот огромные времена, гораздо больше возраста вселенной. Если взять параметры атома, посчитать классически, то выяснится примерно 10^{-13} с. Совершенно ясно, что такая классическая картинка тоже никуда не годилась. Научный мир оказался в некотором смысле в ступоре, ну ступор этот был быстро разрешен работами Бора.

Лекция 3. Корпускулярно-волновой дуализм. Строение атома

Модель Томсона

В начале двадцатого века выяснилось, что свет помимо волновых свойств, обусловленных тем, что свет, это электромагнитное поле, которое описывается волновым уравнением Максвелла, в ряде экспериментов проявляет корпускулярные свойства. То есть, ведет себя, в зависимости от экспериментальной ситуации, как частица, или как волна. Причем свойства этих частиц, а именно энергия и импульс связаны с характеристиками света, как волны с участием новой для того времени мировой константы, постоянной Планка h . Постоянная Планка - это универсальная величина, действительно фундаментальная константа, входящая во все законы микромира, для которых релевантно квантовое описание. Сейчас раскроем, то, что выяснилось уже во втором десятилетии двадцатого века, что не только свет, но и материя, электроны в атомах, ведут себя существенно не классическим образом.

Классическая физика не способна описать атомную структуру материи. Сама по себе гипотеза об атомарном строении вещества на рубеже веков достаточно прочно отвоевала себе место в сознании физиков. Но вот, что такое атом, физики еще не знали. Про существование электронов было известно. Господствовала модель Томсона. Модель Томсона известная на жаргонном названии как: «Пудинг с изюмом», речь шла о том, что атомы — это некая «среда», заряженная положительно и в этой среде вкраплены «изюминки» - отрицательно заряженные электроны.

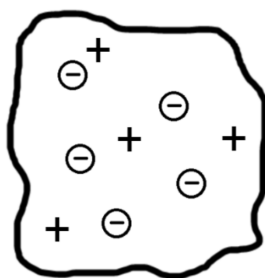


Рис. 3.1. Модель Томсона

В среднем заряд атома нейтрален. Электроны как-то там внутри сидят неподвижно. Эта модель сама по себе неплоха, и внутренних противоречий с точки зрения классической физики в ней нет. Как всегда, ситуацию изменил экспериментальный результат, полученный в лаборатории Резерфорда примерно в 1913 году. Вначале была опубликована статья с экспериментальными результатами молодых сотрудников,

которые собственно это намеряли, это были Гейгер и Марсден. Через год вышла статья Резерфорда уже с философской интерпретацией. В экспериментах лаборатории Резерфорда тонкую металлическую фольгу в вакууме облучали потоком α -частиц. α -частицы (к тому времени это уже хорошо знали) это ядра гелия, состоящие из двух нейтронов и двух протонов каждая. Если нейтрон или протон, условно говоря, в 2000 раз тяжелее чем электрон, то α -частица получается в 8000 раз тяжелее. Если в масштабе сделать, наверное, электрон — это теннисный мячик, по сравнению со слоном. То есть быстро движущиеся α -частицы электроны просто не замечают. Если α -частица на чем-то рассеивается это не электроны.

Экспериментаторы поместили экран, покрытый люминофором. Попадания α -частицы в этот экран вызывало вспышку, можно было посмотреть, как α -частица в веществе отклоняется. Выяснилось, что большая часть α -частиц пролетает через эту пластинку, как будто ее и нет, а небольшая часть отклоняется на значительные углы.

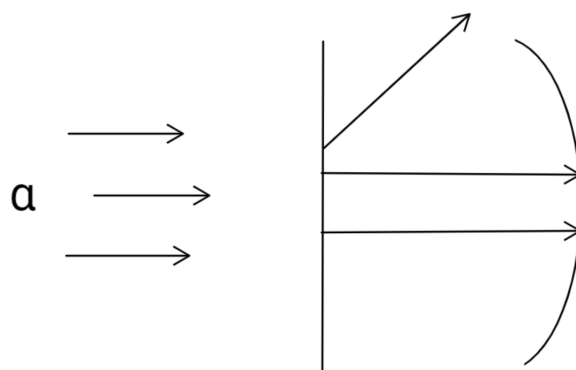


Рис. 3.2. Эксперимент

С картиной с равномерно заряженным большим остовом атома, такой эксперимент не вяжется. Картина выглядит так, как будто есть небольшое количество рассеивателей, на которых α -частицы рассеиваются сильно, то есть по массе сравнимые или больше чем α -частица. Но эти рассеиватели очень малы в своих линейных размерах, поэтому очень небольшой процент α -частиц их вообще замечает. Сейчас мы конечно знаем, что это атомные ядра. Так их сразу Резерфорд и назвал. Он установил анализом рассеяния, что рассеяние имеет природу, в первую очередь, кулоновского отталкивания, α -частицы рассеиваются так, как должны рассеиваться положительно заряженные частицы на положительно заряженных центрах, а ядро если имеет собственный размер, то этот размер примерно в 3000 раз меньше чем размер атома. Для того чтобы эксперименты Резерфорда объяснить пришлось отказаться от пудинга с изюмом и нарисовать то, что рисуют сейчас. Маленькое сильно заряженное

ядро, около него каким-то образом расположены электроны. Электроны заряжены отрицательно, ядро заряжено положительно.

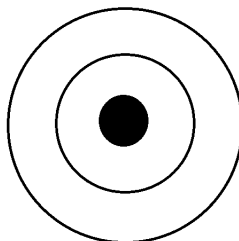


Рис. 3.3. Модель атома

С точки зрения классической механики это Кеплерова задача, электрон должен вращаться вокруг ядра. Однако, такая картинка с точки зрения классической физики уже оказывается противоречивой. Заряд движется ускорено, он должен излучать электромагнитную волну, соответственно теряя энергию и со временем падая на притягивающий центр. Заметим, что планеты, обращающиеся вокруг звезды, тоже излучают гравитационную волну и тоже падают на свою звезду, но очень медленно.

Больше чем возраст вселенной получится характерная оценка для времени, например, в случае Земли. А если сделать оценки для скорости падения на ядро электронов в классическом атоме Резерфорда, то выяснится, что и наносекунду электрон не живет. Некое серьезное непонимание возникло.

Описание Бора

Через год решение предложил Бор. Он рассматривал, как частный важный случай атом водорода и предложил свои знаменитые постулаты, которые позволили описать на словесном уровне без явных противоречий, что происходит в атомах. Электроны, по Бору, вращаются по круговым орбитам, при этом разрешенными являются только определенные орбиты, а не какие угодно, как в классической задаче. Энергия поглощается, излучается порциями, квантами, фотонами определенной энергии, соответствующими разнице энергий между двумя орбитами на которую происходит переход. И существует орбита с минимальной энергией, откуда электрон сам по себе

уже никуда не переходит, потому что у системы больше нет возможности уменьшить энергию. Это не есть теория, это просто словесное описание, но оно позволило говорить о стабильных атомах, содержащих ядро и вращающихся вокруг него электронов, объяснило важную вещь - характеристики спектральных линий атома водорода.

Атом водорода, как и любой другой атом, можно поместить в электрический разряд, тогда эффективно температура оказывается большой в этом разряде, и атомы начинают светиться в соответствии с этими самыми переходами, их можно поместить. И действительно видно, что спектр состоит из набора очень узких дискретных линий. С точки зрения классической физики непонятные обстоятельства, а с точки зрения модели Бора ясно, что если уровни дискретные, то и энергии, с которыми излучаются или поглощаются фотоны в уединенном атоме водорода, совершенно определенные. Какие же это орбиты? У Бора есть некий вывод в его работе, не очень важен ход мыслей, важна для нас итоговая формула. Вспомним постоянную Планка, размерность постоянной Планка это **эрг*секунду** действия. В физике есть другая величина, имеющая ту же самую размерность - это угловой момент. Импульс умножить на расстояние от центра вращения до того, что вращать.

$$M = -pR$$

Размерность такая же, как у постоянной Планка. Проверим, импульс — это грамм на скорость $\frac{г*см}{с}$, R - это сантиметры, значит $\frac{г*см^2}{с}$, $\frac{г*см^2}{с^2}$ - это эрг, значит **эрг*с**, значит все правильно. Такая же размерность постоянной Планка. По Бору имеют право на жизнь только те орбиты, для которых момент импульса равен целому числу постоянной Планка $M = n\hbar$. Простая формула и важно то, что опять постоянная Планка в теории появилась. В прошлый раз говорилось только про свойства света так или иначе, сейчас говорится про свойства материи. Мы опять вынуждены написать постоянную Планк. С исторической точки зрения интересно, что на работу Бора внимание не обратили, по-видимому, дело в том, что относилась она только к атому водорода и была воспринята, как некий частный результат не понятно что, означающий для природы в целом.

Через год после публикации последовали результаты экспериментов Мозли, тоже в лаборатории Резерфорда. Он занимался тем, что исследовал спектр рентгеновских волн, испускаемых атомами после того, как в них сильно энергичным внешним электроном выбит один из собственных электронов атома. У атома много электронов, один из них удалили, атом как-то релаксирует после этого, высвечивается свет. Если выбиваем внутренний электрон из внутренних оболочек, то это невидимый рентген, потому что энергии характерные больше. И выяснилось, что самая сильная из наблюдаемых линий имеет энергию точно такую же, как переход в атоме

водорода, соответственно точно то же самое, что предсказывал Бор с точностью до дополнительного множителя. Мозли в 1914 году - с точностью до дополнительного множителя $(z - 1)^2$, где z - заряд ядра. Очень важные эксперименты, несправедливо выпадающие из большинства изложений истории развития физики. Во-первых, это просто первый физический эксперимент, в котором появился заряд ядра, номер атома в таблице Менделеева. Все электроны ободрали с тяжелого атома сложно, тогда этого не умели, поэтому заряд померять не могли. Догадывались, что номер в таблице Менделеева важная вещь, но напрямую куда заряд не входил. Во-вторых, стало ясно, что линейчатый характер спектра и, собственно говоря, от уровня Бора это что-то универсальное для всех атомов в целом. Почему z^2 , это поймем через несколько лекций. Минус один, потому что по самой близкой к ядру орбите обращается два электрона, как вы знаете из химии, это s_0 орбиталь. Это линия излучения возникает из-за того, что выбивается один из них, получается вакансия, и потом электрон со следующего возбужденного уровня туда падает. Этот подающий электрон видят не заряд ядра, а заряд ядра, экранированный другим оставшимся из s электронов, поэтому -1 .

На тот момент это все было не понятно, но было и неважно. Важным было понимание, что теория атома Бора имеет отношения к атомам вообще, а не только к атому водорода. И после этого произошёл некий взрыв, и теория атома Бора была принята в качестве основной концепции основного взгляда на устройство атомов. Мозли погиб в первую мировую войну, он был призван на фронт, воевал за Англию, где-то около Турции погиб. 1921 год, Де Бройль. Работа Де Бройля по волновой структуре материи. Логика, которую Де Бройль предложил в своей кандидатской диссертации была следующая — мы знаем на примере фотонов, что физические объекты могут одновременно проявлять и свойства волны, и свойства частицы, при этом характеристики волны и характеристики частицы оказываются друг с другом связанными посредством соотношений включающих постоянную Планка. Именно энергия частицы это

$$E = \hbar\omega,$$

где ω - это частота волны, а импульс частицы — это $p = \hbar k$, где k - это волновой вектор волны.

Описание Де-Бройля

Второе соотношение было не настолько хорошо известно, еще комpton-эффект не наблюдали, но, тем не менее, уже понимали, что должно быть вот так. Де Бройль

предложил следующую простую вещь. Представим себе, что эта ситуация носит общий характер и не относится только к фотонам. То есть, любой частице сопутствует некая волна. И характеристики этой волны связаны с характеристиками частицы посредством таких двух простых соотношений. Тогда из частиц хорошо знали электроны. Припишем электрону, имеющему известную энергию в атоме Бора, соответствующий волновой вектор, соответствующую частоту, и посмотрим, как этот волновой вектор и соответственно длина волны $\frac{2\pi}{k}$ соотносится с Боровской орбитой. Оказывается, очень просто, Боровские орбиты можно получить если потребовать, чтобы на орбите укладывалось целое число длин волн Де Бройля. Если говорить о том,

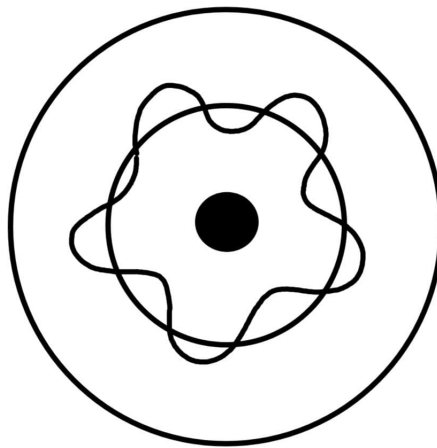


Рис. 3.4. Модель атома с целым числом Де Бройля на орбите

что электрону сопутствует волна, это требование совершенно естественное. Представим себе какой-то волновод, по которому ходят волны, когда стоячая волна будет тогда, когда целое число длин волн укладывается, тогда можно сказать, что будет конструктивная интерференция волн, пробежавших разное количество кругов, если нет, то волна сама разрушится. Это хорошо известно всем, кто имел дело со стоячими волнами, например, это хорошо известно всем, кто играет на гитаре. Основной тон струны это, когда вся струна колеблется, концы неподвижно закреплены, полпериода синуса на струне уместается. Есть следующая мода колебаний флажолет на октаву выше, то есть два раза выше частота, когда целый период синуса уместается на длине струны и так далее. Значит целое число длин волн Де Бройля на Боровской орбите позволяет полностью естественным образом получить модель атома Бора. Пока совершенно не ясно, что это за волна, какова природа этой волны.

Можно проверить экспериментально. Электроны не только в атоме, в тот момент, имелись в распоряжении экспериментаторов, прекрасно умели делать пучки электронов заданной энергии, соответственно заданной длиной волны Де Бройля. Естественное экспериментальное решение. Чтоб померять длину волны, надо заста-

вить эту волну на чем-то дефрагировать либо интерферировать. Для того чтобы понять на чем, надо понять масштаб длины волны. Потому что если мы сделаем оптическую дифракционную решетку, например, волна гораздо короче, мы ничего не увидим. Если посчитать, то при характерной энергии электронов на уровне десятков электронов вольт, то есть если электроны разгонять напряжением на уровне десятка вольт, то длина волны Де Бройля получается на уровне от ангстрема до нанометров, то есть порядка межатомного расстояния в кристаллической решетке. Оптически дифракционные решетки не годятся, зато годятся природные, годятся кристаллы. Опыт Дэвисона-Джермера, взяли монокристалл, померили межатомное расстояние дифракции рентгеновских лучей с известной длиной волны, и потом на тот же самый кристалл направили пучок электронов с энергией порядка 40-50 электронвольт. И действительно, кроме зеркального пика, увидели дифракционные.

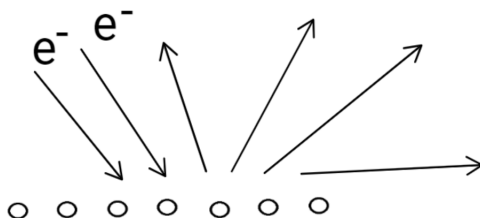


Рис. 3.5. Пример

Положение этих дифракционных пиков полностью описывалось картиной дифракции волны с длиной, полученной по формуле Де Бройля на решетке с заданным периодом. Это примерно 1926 год, прямое экспериментальное подтверждение того, что частицы, в нашем случае электроны, также обладают волновыми свойствами. Таким образом, бегло пробежавшись по истории развития физики соответствующего периода, приходим к выводу о том, что многие физические объекты могут проявлять как свойства волны, так и свойства частиц. Два естественных вопроса: «Что же это за волна?» и более фундаментальный вопрос - «Как же так вообще может быть?». Наконец третий вопрос - «Если это действительно так, то какие следствия отсюда происходят?». На все три вопроса мы получим первичные ответы. Начнем с третьего. Приведем пример, показывающий, что если, например, свет может вести себя как волна и как частица, мы должны принципиальным образом поменять философский взгляд на результат физического эксперимента. Рассмотрим следующий простой мысленный эксперимент. Возьмем пучок света, свет возьмем слабый, чтобы фотоны в нем шли сравнительно редко, направим на полупрозрачное зеркало, часть его проходят, а часть его отражается. Поставим два детектора. Посмотрим, как эти детекторы срабатывают.

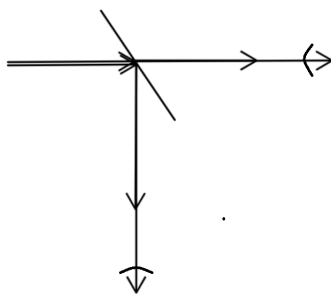


Рис. 3.6. Пучок света на полупрозрачное зеркало

Возможна ли ситуация, когда сработали два детектора одновременно, в принципе конечно возможно, но она означает простую вещь, что случайно в этот момент времени два фотона упали на наше полупрозрачное зеркало — один пошел вниз, другой пошел вправо. А один фотон идет или в один детектор, или в другой. Фотон, упав на полупрозрачное зеркало, выбирает по какому пути он идет, и дальше идет или в низ, или вверх. Выясним, почему эта вещь неправильная. Возьмем ту же самую установку с полупрозрачным зеркалом, детекторы уберем, поставим вместо этого зеркала два обычных уже глухих и соберем то, что получится на экране.

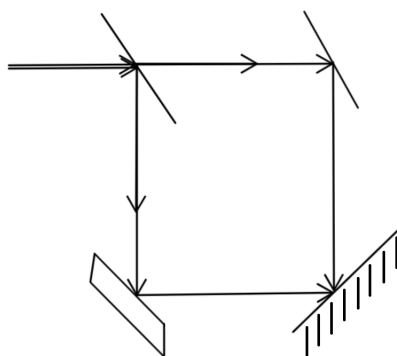


Рис. 3.7. Установка с полупрозрачным зеркалом

Если источник света хороший, то на экране мы увидим интерференционные полосы. Интерференционные картины обязаны своей жизнью тем, что складываются две волны, прошедшие по двум разным путям, в зависимости от точки, конструктивно либо деструктивно. Соответственно либо ярко, либо тускло в этой точке. Но для того, чтобы существовала интерференционная картинка надо, чтобы волна одновременно шла и по одному пути, и по-другому, так же как только что фотон делал выбор. Может быть, надо уменьшить интенсивность света, который подается на систему. Ничего подобного, сколько не зарезай интенсивность входящего света, интерферен-

ционная картинка никуда не девается пока хоть что-нибудь можно видеть.

Таким образом, предположение о том, что фотон делает выбор в тот момент, как рассеивается на полупрозрачном зеркале, оказывается неправильным, так как во втором эксперименте никакого выбора нет, и он одновременно идет по двум пучкам. Приходится сделать заключение, что выбор происходит не в тот момент, как фотон проходит через полупрозрачное зеркало, а в тот момент, как срабатывает детектор, в тот момент, как мы производим измерения. Тогда все встает на свои места, если детекторы убрать, если детекторы не срабатывают, то и выбор не делается фотоны благополучно по двум плечам приходят и интерферируют. Но никаких формальных противоречий нет, но внутреннее сопротивление очень большое, как так он выбор делает только когда померяли, а если тут километр, а тут два, то же самое, оказывается, что да, что, то же самое.

До тех пор, пока не сработал детектор, фотон находится в не определившемся состоянии, вот именно такого рода рассуждения приводят к большому количеству, кажущихся парадоксов. Самые известные из них, это парадокс Эйнштейна-Подольского-Розена, они говорили, что такого не может быть, вы что-то делаете, достоверно знаете, что есть, или достоверно знаете, что нет. На самом деле парадокса никакого нет, потому что информация никакая не передается, но проговорить это еще раз стоит. Такой умозрительный эксперимент показал, что если мы договариваемся до того, что квантовые объекты это, одновременно имеющие, и волновые, и корпускулярные свойства сущности, то надо существенным образом менять наш взгляд на природу физического измерения. Второй вопрос: «Как может быть вообще, что что-то одновременно является и частицей, и волной, когда частицы и волна, это совершенно разные объекты?».

Монохроматическая волна не имеет собственного размера, существует во всех точках пространства одновременно. А частица - в пространстве локализованная и имеющая заданную координату. Этот вопрос оказывается самым простым, решается простым математическим образом. Озвученная проблема, как сделать из волны хоть что-то похожее на частицу, как сделать хоть что-нибудь локализованное в пространстве. Из физических посылок для нас важен принцип суперпозиции, которому удовлетворяют все волновые явления. Если взять две разных волны, например, с разными волновыми числами, удовлетворяющих тому или иному волновому уравнению, то решение тоже будет удовлетворять этому волновому уравнению. Можно взять не две, можно взять много.

Если есть

$$E_k e^{i(kr - \omega_k t)}$$

Это плоская волна, E_k - это амплитуда, в нотацию пишем комплексную волну, имея в виду, что на самом деле прибавляем комплексно сопряженную, таким образом только действительная часть входит, значит, напишем комплексную волну. Тогда решением соответствующих уравнений будет

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

для любого распределения амплитуд E_k . То, что написано, это просто интеграл Фурье, с математической точки зрения. С физической точки зрения — это выражение принципа суперпозиции. Для простоты возьмем одномерную систему и посмотрим на какой-нибудь фиксированный момент времени, например, $t = 0$. Выберем E_k в виде гауссова пика.

$$E(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\delta k^2}} e^{ikx}$$

Возьмем интеграл, такие интегралы, содержащие квадратичные формы переменных интегрирования в показателе экспоненты, хорошо брать, дополняя то, что в экспоненте до полного квадрата. Добавляем второе слагаемое, такое чтобы при возведении в квадрат получился нужный линейный член. Добавили ik_0x - некую константу

$$E(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\delta k^2}} e^{ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{k-k_0}{\delta k} + ix\delta k\right)^2} + ik_0x - \frac{1}{2}\delta k^2 x^2 = C$$

Берем интеграл, для этого надо сделать замену переменных k на все выражение формулы, после этого больше буквы k нигде нет, гауссов интеграл по d соответствующее выражение даст просто константу, зависимости 2 выскочат, но x никак не появится в результате этого интегрирования, это просто сдвиг переменной интегрирования на определенное значение. Таким образом, пишем — константа, не зависящая от x , на то что осталось. Здесь тоже можно собрать полный квадрат

$$e^{ik_0x - \frac{1}{2}\delta k^2 x^2}$$

x_0 комплексное, перед нами гауссов пик. Нарисуем, что получилось, глядя на формулу. Одна ось $E(x)$ - есть некая огибающая x^2 , $e^{-\frac{1}{2}\delta k^2 x^2}$, на фоне этой огибающей есть осцилляция с волновым вектором k_0 .

Нарисуем период, это $\frac{2\pi}{k_0}$ и ширина всего этого пика это $\frac{1}{\delta k}$

То, что мы получили, носит название гауссового волнового пакета. Гауссово, потому что гауссов пик в качестве огибающей, хоть в координатном, хоть в исходном Фурье представлении, а волновой пакет, потому что перед нами нечто очень похожее на плоскую волну, но собранное в некий пакет, имеющий конечный размер в

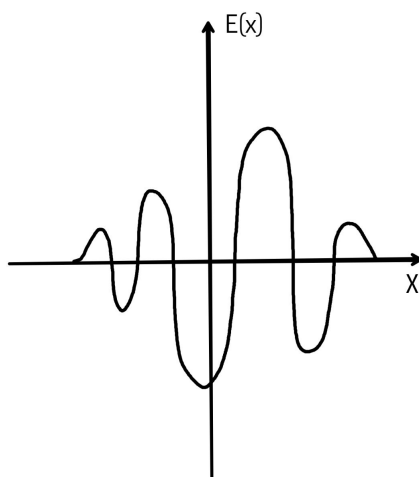


Рис. 3.8. Огибающая с осцилляцией

пространстве. Если говорить о волнах, можно локализовать их в пространстве, по крайней мере, на сколько-то, но ценой того, что мы будем иметь дело не с монохроматической волной, а с некой сборкой с волновым пакетом, куда входят с разными весами разные волновые числа. Видно характер связи между близостью того, что начинали к монохроматической волне и пространственной локализации волнового пакета. Если δk взять очень маленьким, перед нами практически монохроматическая волна. Вклад в интеграл дают только k очень близкий к k_0 , в любом случае вклад в этот интеграл дает только k отстоящий от k_0 примерно на δk , чем δk меньше, тем разброс пока меньше, но если δk уменьшать, то пространственная локали-

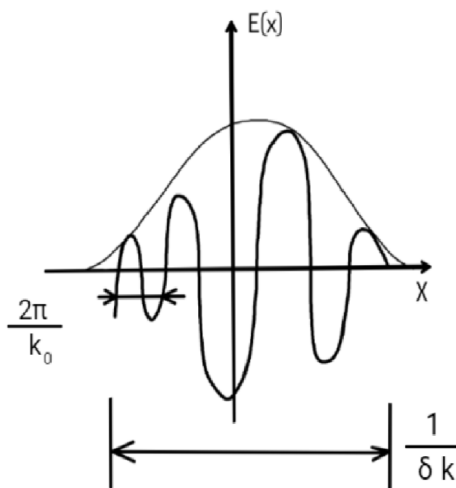


Рис. 3.9. Огибающая с осцилляцией

зация падает. Значит, характерный размер в пространстве для волнового пакета мы вынуждены увеличивать. Таким образом, естественно задаться вопросом — можно ли что-то здесь поменять, если взять не гауссово огибающую, а какую-то другую и ответ на этот вопрос состоит в том, что это соотношение можно испортить. То есть несложно сделать огибающую такую, что $\delta r * \delta k$ будет сколь угодно велика. Но представим себе два пакета. Один находится в одном месте, а другой в другом, значит δr вот в такой комбинации большая, а если каждый из волновых пакетов собран, то δk сильно не поменялась по сравнению с одним волновым пакетом. Таким образом испортить эту штуку можно, а вот улучшить нет. Гауссов профиль наилучший с точки зрения соотношения $\frac{\delta r}{\delta k}$.

$$\Delta r * \Delta k \approx 1 \text{ Gauss}$$

В случае общего положения

$$\Delta r * \Delta k \geq 1$$

Перед нами простейший вид соотношения неопределенностей для волновых пакетов. Методом домножения обеих частей на постоянную Планка можно сделать его более квантовым. p по Де Бройлю - это $k\hbar$

$$\Delta r * \Delta k \geq \hbar$$

то есть, домножили на $\hbar$ лево и право. Что еще можно сделать с волновым пакетом? Можно ввести в рассмотрение время, для этого в формулах, которые мы писали добавить зависимость от времени. Важно следующее, во-первых, концепция волнового пакета позволяет примирить волновую и корпускулярную картину мира. Волны можно локализовать в пространстве, но локализовать в пространстве их можно не идеально, а кроме того, за эту локализацию в пространстве приходится платить неопределенностью импульса и возникает соотношения неопределенностей координаты и импульса волнового пакета, являющегося следствием фактических свойств преобразования Фурье.

Вообще соотношение определенности в квантовой физике, это следствие волновой природы квантовых объектов. Мы проделали всю предварительную работу, которую следовало проделать для того, чтобы дать ответ на вопрос: «Что же это за волна?», «Волна, какой сущности?». Волна электромагнитная — это колебания электромагнитного поля, волна на воде — это колебания уровня воды, а вот волна Де Бройля для электрона — это волна чего? Эту сущность можно только назвать, потому что классического аналога у нее нет, и, соответственно, классических аналогий привести нельзя. Объект этот был введен вместе с формализмом квантовой механики в работах, по-видимому, Шредингера в 1926 - 1927 году, примерно носит название волновой функции, обозначается буквой Ψ , в некоторых случаях буквой ϕ , зависит от

координат и от времени $\Psi(r, t)$, и в каждой точке пространства в заданный момент времени является комплексным числом. У комплексного числа есть, как положено, амплитуда и фаза. Амплитуда волновой функции имеет ясный физический смысл, а именно квадрат модуля волновой функции — есть плотность вероятности на частицу в заданный момент времени, в заданной точке пространства

$$|\Psi^2(r, t)| = p(r, t)$$

Какая вероятность того, что сработает фотодетектор. Узнаем откуда-то волновую функцию фотона, смотрим, насколько она велика по модулю в точке, где находится фотодетектор, вот и вероятность того, что в заданный момент времени фотодетектор щелкнет. Кроме модуля есть еще фаза у комплексного числа. Фаза волновой функции физического смысла не имеет, все формулы теории оказываются неизменными, если фазу волновой функции во всех точках пространства одновременно поменять на одно и то же значение. Ни на какие наблюдаемые величины это не влияет. Относительная фаза волновой функции, в разных точках пространства — это физически осмысленная величина. Как любую волну, волновую функцию можно заставить интерферировать и в зависимости от того как фазы будут складываться будет либо конструктивная, либо деструктивная интерференция, что собственно и видели в эксперименте Дэвиссона-Джермера по интерференции и по дифракции электронов. Еще про волновую функцию мы знаем, что если частица вообще существует, то интеграл плотности вероятности найти ее в каждой из точек частиц должен быть равен единице

$$\int |\Psi|^2 d^3r = 1$$

– нормировка волновой функции. Если не поняли с каким объектом работает квантовая механика, то называли этот объект. Теперь выясним, как этот объект связан с тем, что мы меряем, и каким уравнениям динамика этого объекта подчиняется. Ответ на первый вопрос, «Как найти среднее значение, например, координаты?», — если есть плотность вероятности, то формулу написать несложно. Среднее значение в квантовой механике обозначается треугольными скобками. Среднее значение координаты, это есть интеграл по всему пространству r умножить на плотность вероятности, обнаружить частицу в этой точке. Будет удобно в этой формуле написать Ψ^2 , а $\Psi \star \Psi$, то же самое. $\star$ — это комплексное сопряжения. Напишем это все со звездочкой

$$\langle r \rangle = \int \Psi^* r \Psi d^3r$$

Среднее значение импульса p воспримем пока, как просто постулат.

$$\langle p \rangle = \int \Psi^* (-i\hbar \frac{d}{dr}) \Psi d^3 r$$

Оправдаться за эту формулу несложно, можно взять волновую функцию в виде плоской волны

$$\Psi_\alpha = e^{ikr}$$

у нее нормировка сложности в полном пространстве, потому что модуль везде одинаковый. Если на e^{ikr} , подействовать этим оператором

$$\langle p \rangle = \int \Psi^* (-i\hbar \frac{d}{dr}) \Psi d^3 r$$

получим

$$-i\hbar \frac{d}{dr} e^{ikr}$$

выскочит как раз при дифференцировании $-ik$ и правильным образом съест мнимость и получится

$$-i\hbar \frac{d}{dr} e^{ikr} = \hbar k e^{ikr}$$

$\hbar k$ это импульс.

Действительно на примере плоской волны хорошо видно, что такой оператор вызывает появление импульса. Если у меня суперпозиция, то таким же образом, этот оператор сработает. В квантовой механике, как мы уже знаем, не всегда можно точно сказать, какой у частицы импульс или какая у нее координата. Типично наоборот, мы знаем, с некоторой погрешностью, и то, и другое — есть соотношение неопределенностей между этими погрешностями, но способ вычислить средние значения есть, мы его написали выше. И наконец, уравнение, которому подчиняется волновая функция

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \Psi + V(r,t) \Psi$$

речь идет о системе, состоящий из одной частицы во внешнем потенциале, где U внешний потенциал, минус из-за мнимой единицы. Квадрат оператора импульса, деленное на удвоенную массу — это кинетическая энергия $p^2 * \frac{\hbar^2}{2m}$, в которой вместо p подставлена вот эта формула Кинетическая энергия плюс потенциальная энергия,

полная энергия частицы, выраженная через импульс и координату — то, что в теоретической механике называется *функция Гамильтона*. В квантовой механике эта же величина называется *оператором Гамильтона* или *гамильтонианом*. Оператор импульса - $\hat{p}$ (крышечку над буквами в квантовой физике ставят, чтобы обозначить, что речь идет об операторе)

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dr}$$

то же самое уравнение пишем в виде

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dt} \Psi = \hat{H} \Psi$$
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

Когда Гайзенберг и Шредингер писали уравнения квантовой физики, они их взяли из хорошего знания, в первую очередь, уравнений теоретической механики. И тут видно, что связь с теоретической механикой большая, но для нас это выглядит как формула упавшей с неба, но в каком-то смысле с неба упали и законы Ньютона. Точнее говоря, не упали с неба, а были установлены и проверены посредством анализа экспериментальных данных. С уравнением Шредингера то же самое. Написано из некоторых соображений, но конечно окончательным подтверждением правильности теорий, полученных на основе уравнения Шредингера, является очень хорошее количественное совпадение результатов теории и экспериментальных данных. Но кое-что можно проверить, можно проверить, во-первых, то, что уравнение Шредингера не приводят сразу же ни к каким неправильностям, например, если волновая функция удовлетворяла условиям нормировки в начальный момент времени, то и в течение всей эволюции эти условия нормировки не испортятся. Кроме того, важным является выполнение принципа соответствия. Классическую механику никто не отменял, поэтому как некий предельный случай, обычно речь идет о пределе малой постоянной Планка, уравнения квантовой механики должны переходить в уравнения классические. Мы должны увидеть из уравнений, что происходит со средним значением координаты, что происходит со средним значением импульса во времени. Хорошо бы, чтобы соответствующие выражения имели некий классический предел. В-третьих, с уравнением Шредингера вообще надо поработать, понять, как его решать, какие получаются решения и, конечно, какое отношение получившиеся решения имеют к реальной окружающей нас физике.

Лекция 4. Частица в потенциальной яме

Уравнение Шредингера

Появилась ключевая величина — это волновая функция. Комплексно-значная функция, определенная во всех точках пространства, квадрат ее модуля, это вероятность найти частицу в заданной точке. Было написано выражение для среднего значения координат и среднего значения импульса и, видимо, самое главное — было выписано уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = \hat{H}\Psi$$

где, если речь идет об одной частице во внешнем потенциале,

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) + U(r)$$

Динамика, определяемая уравнением Шредингера должна в каком-то пределе удовлетворять принципу соответствия, то есть квантовая механика является не патологической с той точки зрения, что в определенном пределе из нее должны следовать уравнения классической механики, в данном случае уравнение Ньютона для средней координаты и среднего импульса частицы. Кроме того, надо ожидать, что в хорошей правильной теории будет сохраняться нормировка. То есть, если вероятность существования частицы где-либо в пространстве равнялась

$$\int \Psi^*(r)\Psi(r)d^3r = 1$$

в какой-то один момент времени, то в любой другой момент времени это тождество тоже выполнено. Проверим, что уравнение Шредингера делает с условием нормировки

$$\frac{d}{dt} \int \Psi^*(r)\Psi(r)d^3r$$

интеграл с дифференцированием меняем местами, дальше надо вычислить производную от произведения, используя стандартное выражение. Первое слагаемое интеграл Ψ^* производная по времени от Ψ в уравнении Шредингера она написана $\frac{1}{i\hbar}$, напомним кинетическую часть, и нарисуем тройной знак интеграла

$$\frac{d}{dt} \int \Psi^*(r)\Psi(r)d^3r = \frac{1}{i\hbar} \iiint \Psi^* \left(\frac{1}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) + U(x,y,z) \right) \Psi dx dy dz$$

Второе слагаемое, точно такое же, но дифференцирование по времени от Ψ^* . Комплексно-сопряженная от производной по времени, это производная по времени от комплексно-сопряженного, и комплексно-сопряженное от произведения, это произведение комплексно-сопряженных. Больше ничего отсюда знать не надо. Поэтому пишем $-\frac{1}{i\hbar}$, «-» - комплексное сопряжение от i в знаменателе, затем снова трехкратный интеграл

$$-\frac{1}{i\hbar} \iiint \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) + U(x, y, z) \right) \Psi^* dx dy dz$$

Хорошо бы, чтобы это выражение было равно нулю, чтобы во времени нормировка не менялась, убедимся, что это действительно так. Но прежде всего слагаемые, которые содержат потенциал, тривиальным образом равны друг другу $\Psi U \Psi$ произведения и тут $\Psi U \Psi^*$, что абсолютно одинаковый интеграл, различающийся только знаком, возникшим из-за комплексного сопряжения мнимой единицы. Значит U вычёркиваем. Формула

Теперь с производными. Три совершенно аналогичных члена с x, y, z . Выпишем из них какой-нибудь один интеграл

$$\iint dy dz \int (\Psi^* \frac{d^2}{dx^2} \Psi) dx - \iint dy dz \int (\Psi \frac{d^2}{dx^2} \Psi^*) dx$$

Для того чтоб увидеть, что эти два интеграла равны друг другу, достаточно произвести интегрирование по частям. Например,

$$\iint dy dz \left(\int \Psi^* d \frac{d\Psi}{dx} - \int \Psi d \frac{d\Psi^*}{dx} \right) = \iint dy dz \left(- \int \frac{d\Psi}{dx} \frac{d\Psi^*}{dx} dx + \int \frac{d\Psi^*}{dx} \frac{d\Psi}{dx} dx \right)$$

думая, что на бесконечности волновая функция обращается в ноль, берем этот интеграл по частям

$$\iint dy dz \left(- \int \frac{d\Psi}{dx} \frac{d\Psi^*}{dx} dx + \int \frac{d\Psi^*}{dx} \frac{d\Psi}{dx} dx \right) = 0$$

Что и требовалось доказать. Каждый из этих трех членов $\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right)$ обнуляется, и действительно нормировка от времени оказывается неизменной. Напишем это явным образом, что

$$\frac{d}{dt} \int \Psi^* \Psi d^3r = 0$$

Специально расписали, как все выглядит для трехмерного случая. Ясно, что можно было одномерным движением ограничиться, никаких принципиальных особенностей тут трехмерность не дает, и в дальнейших выкладках сразу будем писать в одномерье.

Посмотрим на уравнение движения среднего значения координаты $\langle x \rangle$ средняя и среднего значения импульса $\langle p \rangle$ средняя. Вспомним, что в классической физике производная по времени от среднего значения координаты, это импульс разделить на массу скорость, а производная среднего значения импульса — сила, это минус производная от потенциала по времени. Посмотрим, что здесь с производными по времени от среднего $x \frac{d}{dt} \langle x \rangle$ и среднего импульс $\frac{d}{dt} \langle p \rangle$ получится. Записываем, что такое среднее значение x , на этот раз пишу однократный интеграл, чтобы не писать лишнего

$$\frac{d}{dt} \int \Psi^* x \Psi dx$$

и проделываем операции полностью аналогичные тем, которые сделаны выше. Два члена, первый — это $\frac{1}{i\hbar} \int \Psi^*$, правая часть уравнения Шредингера

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int \Psi^* x \Psi dx = \frac{1}{i\hbar} \int \Psi^* x \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \right. \\ \left. + U(x) \right) \Psi dx - \frac{1}{i\hbar} \int \Psi x \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - U(x) \right) \Psi^* dx \end{aligned}$$

Так же, как и в прошлый раз, члены соответствующие

$$U(x)$$

сокращаются. Так же с первыми членами надо делать интегрирование по частям. Сделаем первое слагаемое, которое выпишем, на этот раз не ноль получится, поэтому все буквы будем выписывать.

Первое слагаемое —

$$-\frac{\hbar}{2mi} \int \Psi^* x d \frac{d\Psi}{dx}$$

и второе слагаемое

$$\frac{\hbar}{2mi} \int \Psi x d \frac{d\Psi^*}{dx}$$

Очевидная разница с предыдущим случаем, буквы x , мы вычисляем среднее x , и под дифференциал попадает после интегрирования по частям не просто Ψ^* , а $\Psi^* x$

$$-\frac{\hbar}{2mi} \int \Psi^* dx \frac{d\Psi}{dx} + \frac{\hbar}{2mi} \int \Psi x d \frac{d\Psi^*}{dx} = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\int \frac{d\Psi}{dx} d(\Psi^* x) - \int \frac{d\Psi^*}{dx} d(\Psi x) \right)$$

В результате вычисления дифференциала произведения получается два слагаемых, значит либо $x * \Psi^*$, либо $\Psi^* * x$, производные x по $x = 1$. Таким образом,

$$\begin{aligned} & -\frac{i\hbar}{2m} \left(\int \frac{d\Psi}{dx} d(\Psi^* x) - \int \frac{d\Psi^*}{dx} d(\Psi x) \right) = \\ & = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\int \frac{d\Psi}{dx} \frac{d\Psi^*}{dx} x dx + \int \frac{d\Psi}{dx} \Psi^* dx - \int \frac{d\Psi^*}{dx} \frac{d\Psi}{dx} x dx + \int \frac{d\Psi^*}{dx} \Psi dx \right) \end{aligned}$$

это стандартный способ интегрирования по частям. Напишем, что интегрирование по частям, это

$$\int f g' dx = \int f dg = fg \Big| - \int g df$$

Вычеркиваем два сокращающихся слагаемых

$$-\frac{i\hbar}{2m} \left(\int \frac{d\Psi}{dx} \Psi^* dx - \int \frac{d\Psi^*}{dx} \Psi dx \right)$$

остаются два новых для нас слагаемых, имеющие одинаковый вид, но не равные друг другу. Сделаем их одинаковыми, опять методом интегрирования по частям во втором. На самом деле эти два слагаемых просто равные друг другу, один интеграл равняется другому со знаком минус, если под дифференциал загнать Ψ^* , потом сделать интегрирование по частям, то получится как раз это выражение и минус нарастет за счет интегрирования по частям. Два новых для нас слагаемых друг друга не компенсируют, а напротив получается удвоение

$$-\frac{i\hbar}{2m} \left(\int \frac{d\Psi}{dx} \Psi^* dx - \int \frac{d\Psi^*}{dx} \Psi dx \right) = -\frac{i\hbar}{m} \int \Psi^* \frac{d}{dx} \Psi dx$$

Вспомнив определение средних с прошлой лекции несложно увидеть, что тут написано не что иное, как среднее значение импульса деленное на m . Таким образом,

$$-\frac{i\hbar}{m} \int \Psi^* \frac{d}{dx} \Psi dx = \frac{\langle p \rangle}{m}$$

В точности, без приближений, получилась классическая формула. Единственное, что она связывает — среднее, а не координату импульса, точно определенных координат импульсов в квантовой физике нет.

Дальше вычисляем, что происходит во времени со средним значением импульса. В третий, и в последний раз вычисляем производную по времени.

$$\frac{d}{dt} \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi dx$$

В третий, и в последний раз вычисляем производную по времени.

$$\frac{1}{i\hbar} \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) \Psi dx - \frac{1}{i\hbar} \int \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) \Psi^* \right) - i\hbar \frac{d}{dx} \Psi dx$$

Вновь есть два слагаемых, неприятность в том, что на этот раз третья производная присутствует. На самом деле, если взять по частям один из этих интегралов, то станет ясно, что на этот раз первый кинетический член полностью сокращает другой. Третья производная от Ψ , если два раза интеграл по частям взять, то ноль получается. Дело в том, что никаких дополнительных x -ов там нет, а член

$$U(x)$$

дает нетривиальный не нулевой результат

$$-\frac{i\hbar}{i\hbar} \int \Psi^* \left(U(x) \frac{d}{dx} + \Psi \frac{d}{dx} U(x) \right) dx - \int \left(\left(\frac{d}{dx} \Psi \right) U(x) \Psi^* \right)$$

Слагаемые, включающие в себя производные от волновой функции друг друга, сократили, а слагаемые с производной потенциала остались

$$- \int \Psi \Psi^* \frac{dU}{dx} dx$$

Что это такое не понятно, такого выражения не было. Если там мы прямо оператор импульса получили, то тут мы получили нечто новое. Посмотрим физически, о чем идет речь. Если есть некий волновой пакет из тех, которые мы обсуждали ранее $\Psi(x)$, и на масштабах этого волнового пакета

$$U(x)$$

меняется медленно.

Тогда эта огибающая волнового пакета просто вырежет какое-то характерное значение производной потенциала, то есть силы, действующей на частицу там, где этот

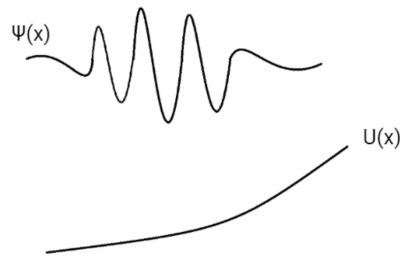


Рис. 4.1. Волновой пакет $\Psi(x)$

волновой пакет расположен. Значит для более формально мыслящих людей можно вблизи точки, где частица расположена, где волновой пакет локализован

$$U(x)$$

разложить в ряд Тейлора. U_0 пропадет, потому что производная берется, а первое слагаемое U_1 , как раз выскочит за знак интеграла и в первом не исчезающем порядке U_1 появится, и минус как раз. Таким образом, производная по времени импульса равняется

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = -\left\langle \frac{dU}{dx} \right\rangle$$

в предположении, что потенциал «медленный». «Медленный» по координате по сравнению с характерным размером частиц. Если можем приближённо думать, что перед нами что-то похожее на классическую частицу, что-то по размеру локализации маленькое, по сравнению с характерными масштабами потенциала классическая ньютоновская физика вполне себе присутствует. Как только потенциал меняется достаточно быстро, это и будет интересно, как только характерный масштаб изменения потенциала становится сравним с характерным масштабным изменением волновой функции, надо точно решать уравнение Шредингера, и то, что будет получаться, будет отличаться от классического результата. И если волновая функция вообще не имеет формы волнового пакета, это же волонтаризм. Если волновой пакет, то это что-то похожее на классику, если волновая функция вообще не имеет форму волнового пакета, то классические уравнения надо выбросить, потому что $-\left\langle \frac{dU}{dx} \right\rangle$ вообще не понятно что обозначает. Опять надо решать точное уравнение Шредингера и смотреть, что получится.

Займемся точным решением уравнения Шредингера в свободном пространстве $U(x) = 0$, либо $U(r) = 0$. Уравнение Шредингера для простоты в одномерье приобретает простой вид

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi$$

Легко найти решение, имеющее вид экспоненты

$$\Psi = \dots e^{i(kx - \omega t)},$$

либо тот же самый множитель «...»

$$\Psi = \dots e^{i(kx - \omega t)} = \dots e^{\frac{i(px - Et)}{\hbar}}$$

Мы понимаем, что физически осмысленное в духе теории Де Бройля. Значит три точки, это некий постоянный множитель. Подействуем левыми и правыми частями уравнения Шредингера на эту экспоненту. Действие левой части дает то, что если производную взять от экспоненты по времени, то выскочит $-i\omega$, либо $-\frac{iE}{\hbar}$. Так как стоит $\hbar$, то лучше второй способ записи. Тогда остается просто E . Правая часть два раза оператором дифференцирования, по координате действуем, каждый раз выскакивает $\frac{ip}{\hbar} i^2$ дает минус $\hbar^2$ знаменателя сокращает $\hbar^2$ числителя, а остается

$$E\Psi = \frac{p^2}{2m} \Psi$$

Достаточно тривиальная формула — закон дисперсии свободной частицы, если под E понимать энергию, то эта энергия равняется

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

Чем плоха написанная формула, чем эта формула не нравится? Константу надо бы найти из условия нормировки. Надо взять константу, возвести в квадрат, проинтегрировать по всему пространству и получить единицу. Этого не может быть, потому что волновая функция, которую мы написали. Это частица, которая находится во всех точках пространства одновременно. Плотность вероятности найти ее где-либо при этом равна нулю, имеет право такая волновая функция на жизнь, но каждый раз надо помнить, что она не очень физична. Физично-волновые функции все-таки локализованные в конечной области. Для того чтобы локализовать в конечной области частицу надо бы посадить в какую-нибудь потенциальную яму, чтобы она убежать не могла оттуда. Этим и займемся. Нас будут интересовать состояния соответствующие в классической физике частицы находящейся в потенциальной яме. Более того нас будут интересовать специальные, в некотором смысле, простые состояния, для которых физические свойства со временем не меняются вовсе. В классической физике

такие неизменные во времени состояния — это просто стационарное состояние, это, в некотором смысле, тривиальный раздел динамики статика. Надо потребовать, чтобы суммарная сила действующей на частицу равнялась нулю, то есть это экстремум потенциала. Больше ничего в классической статике нет. В квантовой физике ситуация гораздо более интересная, и, в некотором смысле, стационарное состояние, это предмет анализа в большей части задач, которые будут в курсе квантовой механики.

Стационарное состояние. Стационарное уравнение Шредингера

Сначала поймем, что такое стационарное состояние в квантовой физике. *Стационарное состояние* — это состояние, в котором свойства системы не зависят от времени. Значит ли это, что волновая функция от времени не должна зависеть? У волновой функции есть амплитуда и фаза. Фаза волновой функции не влияет ни на какие наблюдаемые, это произвольная величина. Поэтому фаза волновой функции имеет право зависеть от времени, как ей заблагорассудится. Если крутятся фаза в целом, с точки зрения физических свойств, состояние является стационарным. Таким образом, нас интересует состояние, имеющее волновую функцию

$$\Psi(r, t) = \Psi(r) e^{i\varphi(t)}$$

Подставим это выражение в уравнение Шредингера, в котором потенциал от времени не зависит. В правой части уравнения Шредингера в операторе Гамильтона стоят операторы, действующие только на координатную часть волновой функции, экспонента просто вынесется, а вот слева стоит производная по времени, она как раз будет действовать на фазу. Получается

$$-\hbar \left(\frac{d}{dt} \varphi \right) \Psi(r) e^{i\varphi(t)} = (\hat{H} \Psi(r)) e^{i\varphi(t)}$$

Экспоненту сокращаем, и видим, что единственное место, где буква t осталась это производная по времени.

$$-\hbar \left(\frac{d}{dt} \varphi \right) \Psi(r) = (\hat{H} \Psi(r))$$

Поскольку так не бывает, значит и эта производная по времени тоже от времени не зависит. А справа от времени не зависит ничего. Таким образом φ может содержать только константный член φ_0 , $\varphi = \varphi_0$ — это начальная фаза, которая не влияет вообще ни на что. Некий линейный во времени член, который напомним в виде

$$\varphi = \varphi_0 - \frac{E}{\hbar}t$$

Тогда производная по времени от $\varphi - \frac{E}{\hbar}t$, $-\hbar$ сокращается, и уравнение Шредингера приобретает вид

$$E\Psi(r) = \hat{H}\Psi(r)$$

В такой форме оно носит специальное название - *стационарное уравнение Шредингера*. В нем зависимости от времени уже нет никакой и нигде, значит надлежит помнить, что это уравнение для координатной части волновой функции, подразумевающая зависимости от времени вида E . Значит

$$\Psi(r, t) = \Psi(r)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

По крайней мере, от одной из букв уравнения Шредингера мы избавились, появилась, правда, это величина, имеющая размерность энергии, имеющая смысл энергии состояния. Ее тоже надо откуда-то определять. Но лучше одна неизвестная, подлежащая определению, величина, чем лишний аргумент. Обращаем внимание, что волновая функция для движения в свободном пространстве, которую написали выше, имеет ровно такой же вид, что является волновой функцией стационарного состояния в бесконечном пространстве.

Рассмотрим какую-нибудь потенциальную яму. С формальной точки зрения самой простой из потенциальных ям является одномерная прямоугольная яма, то есть потенциал, который равен одному значению. Если x по модулю больше определенного значения, и другому меньшему значению, если x меньше этого значения. Пусть это $-\frac{\ell}{2}, \frac{\ell}{2}$. Вопрос о том, где ставить ноль на оси потенциал, это вопрос удобства.

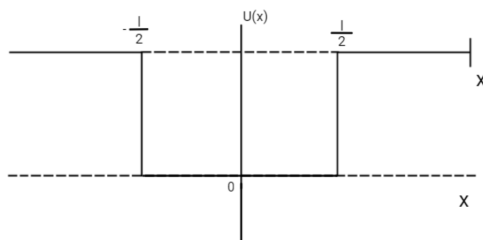


Рис. 4.2. Потенциальная яма

От выбора нуля ничего не зависит. Посмотрим на уравнение Шредингера, в каждом

из этих отрезков и, вообще, на стационарное уравнение Шредингера одномерного движения. Напишем его следующим образом

$$E\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + U(x)\Psi(x)$$

Математически уравнения достаточно сложное, в общем виде на бумаге не решаемое, но, тем не менее, с физической точки зрения, уже знакомое по курсу механики, просто написанное в непривычной форме. На самом деле, это не что иное, как *уравнение гармонического осциллятора*. Напишем уравнение движения гармонического осциллятора, обозначим координату $\ddot{a}$. - жесткость $\ddot{a}$ зависит от времени, и жесткость зависит тоже от времени

$$m\ddot{a}_t = -K_t\ddot{a}_t$$

Два этих уравнения — одно и то же, надо букву t заменить на x , $t \longleftrightarrow x$, а $\frac{K}{m}$, надо заменить на сложную комбинацию

$$\frac{K_t}{m} \longleftrightarrow \frac{(E - U_x)}{\hbar^2} 2m$$

Видно, что оба выражения содержат вторую производную и нулевую производную, то есть они вполне эквивалентны друг другу. Математически от этого смысла не много, так как гармонический осциллятор, зависящий от времени жесткостью пружинки, это сложная задача. Но, во-первых, физическая интуиция, во-вторых, сейчас собрались рассматривать потенциал кусочно-константный, по крайней мере, в течение некоего промежутка времени, от минус $-\frac{\ell}{2}$ до $\frac{\ell}{2}$ жесткость не меняется. Потом жесткость скачком меняется, с новой жесткостью работаем от времени $\frac{\ell}{2}$ до ∞ . На каждом из этих отрезков решение мы уже знаем, это решение имеет вид экспоненты. Значит если U равно константе, жесткость равно константе, то гармонический осциллятор просто меняется со временем по синусу, и волновая функция Ψ тоже имеет вид суммы двух экспонент. $U = const$, то в пределах интервала, где $U = const$ волновую функцию сразу пишем, это есть

$$\Psi = \Psi_+ e^{ikx} + \Psi_- e^{-ikx}$$

и соответственно

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E - U$$

в пределах этого интервала.

Значит, в пределах каждого из этих интервалов волновая функция имеет такой вид. Надо задаться вопросом о знаке для $E - U$, но для гармонического осциллятора знак $E - U$ определен, так как частота должна быть действительной, а иначе это не осциллятор, а *акселератор* — это частица, лежащая на крыше перевернутого потенциала, она свалится с него, в механике такие системы не рассматривают обычно. Тут такого ограничения нет K может в принципе оказаться чисто мнимым если $E < U$, тогда перед нами будет сумма, растущая из подающей экспоненты. Если подумать, то какая-то ситуация и должна быть, потому что если частица локализована в пределах этой, то энергии у неё недостаточно для того, чтобы из ямы выпрыгнуть. У классической частицы она бы соответствовала просто дну ямы, нулю. У квантовой это будет не так,

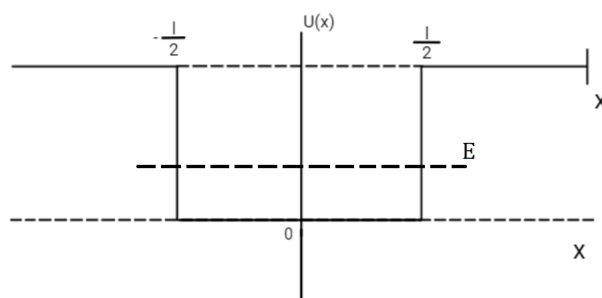


Рис. 4.3. Потенциальная яма для квантовой частицы

С такой простой физической точки зрения стоит ждать, что будет ниже чем край зоны и в двух областях волновая функция будет сделана не из синуса и косинуса, а из растущей и спадающей экспоненты.

Посмотрим на тот же вопрос с точки зрения формальной, с точки зрения нормировки. Если бы в этих крайних интервалах волновая функция действительно была суммой синуса и косинуса, то мы имели бы точно такие же проблемы с нормировкой, которые были для решения в свободном пространстве. Как далеко от ямы мы не уходим, синус по модулю примерно такой же, только он осциллирует. И конечно интеграл по всей оси разошелся бы, ничего бы с нормировкой не вышло. Это физически соответствует тому, что частица ушла бы на бесконечность. А вот если K в этой области мнимая, то есть возможность сходимости интеграла обеспечить.

Две экспоненты, например, одна растет, другая падает, растущая экспонента это для нормировки плохо, еще хуже даже, чем синусоида, а вот спадающая — отлично. Делаем очень важный физический вывод — для того, чтобы найти нормируемую

волновую функцию надо во внешних интервалах оставить только одну экспоненту, спадающую при движении к соответствующей бесконечности. Таким образом, конкретизируем вид волновой функции, который нам нужен

$$x > \frac{\ell}{2}$$

$$\Psi = \kappa x$$

где $-\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = E - U_0$, κ - это EK , U_0 - высота потенциалов

Из двух экспонент оставим одну, которая спадает туда куда надо и ее запишем с каким-то коэффициентом.

$$x < \frac{\ell}{2} \Psi = \Psi_+ e^{\kappa x}$$

на этот раз при движении в минус бесконечность должна спадать волновая функция с другим знаком, поэтому экспоненту оставляем $\kappa(x)$, κ та же самая, потому что потенциал точно такой же.

Если x находится в интервале от $-\frac{\ell}{2}$ до $\frac{\ell}{2}$

$$-\frac{\ell}{2} < x < \frac{\ell}{2}$$

то

$$\Psi = \Psi_+ e^{ikx} + \Psi_- e^{-ikx}$$

Потенциал в этой области нуль, поэтому

$$\frac{\hbar^2 K^2}{2m} = E$$

Мы ближе к тому, чтобы найти решение. В этом решении уже не осталось никаких неизвестных функций, остались только неизвестные константы, их пять штук: Ψ_+ , Ψ_- и E , про которую мы пока ничего не знаем. Логика подсказывает, что теперь надо понять, что же происходит, когда мы переходим из одной области в другую, что происходит с волновой функцией, когда мы перескакиваем, например, в точку $\frac{\ell}{2}$.

Опять вернемся к задаче, к аналогии с гармоническим осциллятором. Вспомним, что волновая функция, это фактически координаты этого осциллятора, выражение,

содержащее энергию, это жесткость осциллятора. Внезапно у осциллятора поменялась жесткость, в какой-то момент времени, с координатами этого осциллятора ничего не произойдет. От того, что мгновенно на частицу начала действовать другая сила у нее поменяется ускорение, но никак не координата. Таким образом,

$$\Psi\left(\frac{\ell}{2}+0\right)=\Psi\left(\frac{\ell}{2}-0\right)$$

справа и слева скачка потенциала волновая функция одна и та же. И точно также ее производная

$$\left.\frac{d\Psi}{dx}\right|_{\frac{\ell}{2}+0}=\left.\frac{d\Psi}{dx}\right|_{\frac{\ell}{2}-0}$$

Значит, нотация $+0$ и -0 должна быть понятной, 0 - бесконечно малая.

Подставляем первое уравнение, в точке

$$\frac{\ell}{2}+0\Psi_{>}e^{-\kappa}$$

сумма двух экспонент

$$\Psi_{>}e^{-\kappa\frac{\ell}{2}}=\Psi_{+}e^{iK\frac{\ell}{2}}+\Psi_{-}e^{-iK\frac{\ell}{2}}$$

Второе уравнение, то же самое. Надо взять производную

$$-\kappa\Psi_{>}e^{-\kappa\frac{\ell}{2}}=iK\left(\Psi_{+}e^{iK\frac{\ell}{2}}-\Psi_{-}e^{-iK\frac{\ell}{2}}\right)$$

Точно то же самое надлежит написать на левой границе. Общий вид будет следующим

$$\Psi\left(\frac{\ell}{2}+0\right)=\Psi\left(\frac{\ell}{2}-0\right)\left|\begin{array}{l}\Psi_{>}e^{-\kappa\frac{\ell}{2}}=\Psi_{+}e^{iK\frac{\ell}{2}}+\Psi_{-}e^{-iK\frac{\ell}{2}}\\ \left.\frac{d\Psi}{dx}\right|_{\frac{\ell}{2}+0}=\left.\frac{d\Psi}{dx}\right|_{\frac{\ell}{2}-0}\left|- \kappa\Psi_{>}e^{-\kappa\frac{\ell}{2}}=iK\left(\Psi_{+}e^{iK\frac{\ell}{2}}-\Psi_{-}e^{-iK\frac{\ell}{2}}\right)\right.\end{array}\right.$$

Условия сшивки на границах интервалов для волновой функции дают по два уравнения для каждой из границ. Их две штуки, значит четыре уравнения в распоряжении, пять неизвестных, еще есть условие нормировки, оно позволяет формально найти нужные пять неизвестных. Тем не менее этого достаточно сложная система, все-таки четыре уравнения, если E считать известным и интересоваться амплитудой $\Psi_{\pm}$, $\Psi_{>}$, $\Psi_{<}$, четыре уравнения, это много.

Упрощения можно достичь, если учесть симметрию системы. Система симметричная

$$U(x) = U(-x)$$

Если мы переворачиваем потенциал, свойства системы не меняются. Если заменить x на $-x$, то свойства системы, свойства потенциала симметрично относительно замены $-x$ на $-x$, можно ожидать, и эти ожидания будут правильными, что физические свойства при замене x на $-x$ не меняются. Это значит, что волновая функция умножается в общем случае дофазовый множитель. Чему равна φ легко понять, если проделать эту операцию дважды

$$\Psi(x) = \Psi(-(-x)) = e^{i\varphi} \Psi(-x) = e^{2i\varphi} \Psi(x)$$

значит $e^{2i\varphi}$ - фазовый множитель в квадрате, это единица, двойная инверсия возвращает систему обратно, а $e^{i\varphi}$ равно либо $+1$, либо -1 . Волновые функции в системах с четным потенциалом бывают двух типов: либо четная, либо нечетная. Либо $\Psi(x) = \Psi(-x)$, либо все $\Psi(x) = -\Psi(-x)$.

Значит, волновые функции классифицируются по неприводимым представлениям группы симметрии потенциала. Тут простейшая симметрия, этих самых неприводимых представлений два. Если более сложная группа симметрии, то значит более сложная классификация. Для тех, кто с теорией групп не знаком, если есть симметрия потенциала определенная, то этому соответствует определенная классификация возможных волновых функций стационарных состояний, определяемая именно базовыми симметричными свойствами. В каждом случае можно выяснить какая.

Учет симметрии позволяет радикально упростить задачу. Если все симметрично, то справа и слева одно и то же, значит, пишем

$$\begin{array}{l|l} \Psi(x) = \Psi(-x) & \Psi(x) = -\Psi(-x) \\ \Psi_+ = \Psi_- & \Psi_+ = -\Psi_- \\ \Psi_- = \Psi_+ & \Psi_- = -\Psi_+ \end{array}$$

По отдельности надо рассмотреть эти два случая, но в обоих из них вместо четырех уравнений достаточно ограничиться написанными двумя.

Осталось разобрать частный случай очень глубокой ямы, который является совсем простым. Нарисуем яму и сделаем ее по возможности очень глубокой. U_0 - высота. Волновая функция подходит к краю ямы, дальше она начинает экспоненциально спадать. U_0 - очень большая величина, так как яма очень глубокая, соответственно

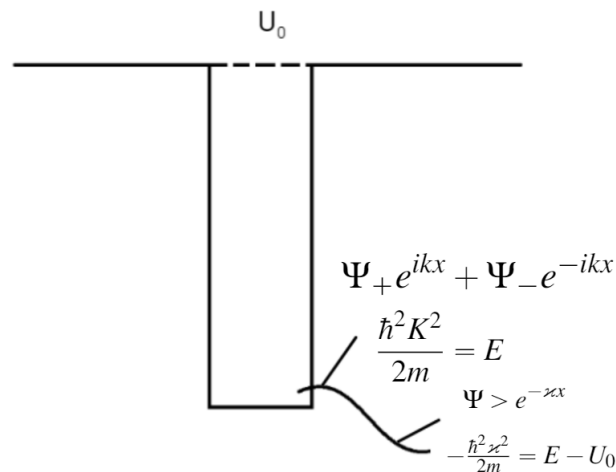


Рис. 4.4. Частный случай очень глубокой ямы

κ , тоже очень велика. Резко спадает волновая функция при выходе за пределы ямы. Если посчитать производную κ выскочит перед экспонентой, то есть производная содержит при себе большую величину κ . Волновая функция и ее производная, как мы только что обсуждали, в точке скачка потенциала непрерывна. Значит внутри тоже производная много больше, в $\sqrt{U_0}$ раз больше, чем волновая функция. А K - величина самая обычная, она не содержит больших параметров. Как может быть, что производная велика по сравнению с волновой функцией, когда никаких больших факторов не возникает при вычислении производной? Ответ — не можем сделать большой знаменатель, надо делать маленький числитель, волновая функция должна быть маленькой, когда мы подходим к краю ямы. Тогда ее отношение к вполне обычной производной будет, как надо маленькой величиной. Значит, в пределе U_0 стремится к бесконечности $U_0 \rightarrow \infty$, волновая функция

$$\Psi\left(\pm\frac{\ell}{2}\right) = 0$$

надлежит забыть про то, что есть какие-то хвосты вне танца ямы волновой функции. Соответственно,

$$\Psi_>, \Psi_< = 0$$

Надо найти решение в виде плоских волн, обращающихся на границе ямы в нуль. Это решение для колебаний струны с закрепленными концами, это синусы либо косинусы, в которых узловые точки находятся на границах ямы. Косинусы - это четные функции, синуса нечетной, как раз как надо. Напишем волновую функцию

$$\Psi\left(-\frac{\ell}{2} < x < \frac{\ell}{2}\right) = \begin{cases} \sin Kx \\ \cos Kx \end{cases}$$

Надо чтобы у косинуса нуль попал в точку $\frac{\ell}{2}$. У косинуса первый нуль, это $\frac{\pi}{2}$, второй нуль - $\frac{3\pi}{2}$ и так далее.

$$\Psi\left(-\frac{\ell}{2} < x < \frac{\ell}{2}\right) = \begin{cases} \sin Kx & K\frac{\ell}{2} = (2n-2)\frac{\pi}{2} \\ \cos Kx & K\frac{\ell}{2} = (2n+1)\frac{\pi}{2} \end{cases}$$

Лекция 5. Волновая функция и уравнение Шредингера

Уравнение Шредингера. Стационарный случай

На прошлой лекции мы ввели важнейшее уравнение, которое будет на курсе, это уравнение Шредингера для волновой функции

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi = \hat{H} \Psi$$

где $\hat{H}$ - это гамильтониан, сумма операторов кинетической и потенциальной энергий, соответственно,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{d}{dr} \right)^2 + U(r)$$

Немного поговорили о свойствах решений применительно к эволюции средних в заданном потенциале и увидели, что минимальному набору требований уравнения Шредингера действительно удовлетворяет, сохраняет нормировку волновой функции, сохраняет вероятность, и обеспечивает классический предел для динамики частицы производная по времени от среднего значения импульса. Определяют ее средним значением силы, и производная по времени от среднего значения координаты, определяется средним импульсом. В этом смысле все хорошо, но пока не интересно, потому что ничего в качестве решения уравнения Шредингера пока не получилось. Это новое начнет получаться сегодня, мы будем говорить сначала, в некотором смысле, о простейших по поведению решениях уравнения Шредингера, о стационарных решениях. Стационарное решение в классической физике, это просто неподвижное решение, частица лежит, например, на дне осциллятора или на дне какого-то другого потенциала. Что такое стационарное решение в квантовом случае, когда наш основной объект, это волновая функция, функция координат и времени? Физическим смыслом волновой функции обладают не все ее составляющие, общая фаза волновой функции, это величина ни в каких наблюдаемых в эксперименте величинах не отражающаяся и прямого физического смысла не имеющая. Поэтому в стационарных состояниях от времени зависит только фаза волновой функции. Чуть-чуть квантифицируем это. Волновая функция

$$\Psi(r, t) = \Psi(r) f(t)$$

где $\Psi(r)$ - некая не зависящая от времени часть $f(t)$ - фазовая намотка $f(t) = e^{i\varphi(t)}$. Если такую волновую функцию рассматривать, то какая бы $f(t)$ не была, никакие

физические величины от времени зависеть не будут и получится, что ищем - стационарную волновую функцию. Не любая $f(t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера. Раз ищем стационарные решения, то потенциал от времени зависеть не будет. Значит есть некая $U(r)$, гамильтониан от времени, таким образом, не зависит. Все, что включает зависимости от времени в уравнение Шредингера, это производная по времени слева. Таким образом, мы получаем то, что берем производную $\dot{\phi}$, дальше волновая функция. Дифференцируем экспоненту, выносим ее и гамильтониан только на координаты действует

$$\dot{\phi} \hbar \Psi(r) e^{i\phi(t)} = e^{i\phi(t)} \hat{H} \Psi(r)$$

Мы видим, что уравнение выполняется, надо только потребовать, чтобы ϕ от времени не зависело $\dot{\phi}(t) = \text{const}$ либо, это значит, что $\phi(t) = \phi_0 - \frac{Et}{\hbar}$, $\hbar$ - постоянная Планка. $-\frac{Et}{\hbar}$ - линейная по времени функция, которую было удобно написать в таком виде. Тогда уравнение Шредингера превращается просто в уравнение

$$E\Psi(r) = \hat{H}\Psi(r)$$

Это уравнение принято называть стационарным уравнением Шредингера, а $\Psi(r)$ принято называть стационарной волновой функцией. При этом обратим внимание на некую условность этих названий, волновая функция стационарного состояния, как мы говорили, от времени зависит, но содержит тривиальную зависимость в виде экспоненты

$$\Psi(r, t) = \Psi(r) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

Величина имеет размерность энергии, и действительно, как легко понять, является энергией стационарного состояния. В стационарном состоянии энергия определена точно, это случай, когда в квантовой физике, некоторая величина не имеет неопределенности. Энергия точно определенная величина, за это платим тем, что никакой зависимости от времени нет. Зависимость от времени тривиальная. Точно так же как с координатой и импульсом, в принципе, можем точно определить импульс, при этом полностью потеряв информацию о координате, либо наоборот. Вот тут точно определена энергия, но нет никакой временной динамики.

Эволюция фазы во времени. Физический смысл скорости вращения фазы. Эффект Ааронова-Бома

Начало отчетов фаз ϕ_0 никакого особого смысла не несет. Заслуживает обсуждения то, как фаза эволюционирует со временем. Потенциал U , это нечто определенное

с точностью до выбора ноля энергии. В классической физике выбор, начало отсчета энергии, ни на что не влияет и тут тоже ни на какую физику, как было, сказано не влияет. Но, тем не менее, в величину E входит, если мы сдвинем начала отсчета энергии для U , точно также сдвинутся все энергии, в том числе, все энергии стационарных состояний. И, таким образом, применяется скорость, с которой во времени вращается фаза волновой функции. Становится яснее, что фаза волновой функции действительно физически не определенная величина, раз уж не только какой-то начальный выбор φ_0 , но и просто скорость эволюции фазы зависит от нашего произвола, от того, как вы выбрали начало отсчета энергии. Тем не менее, звездочка - отступление за пределы программы. Некоторая физика в том, с какой скоростью фаза вращается, есть и физика эта интересная. Рассмотрим две возможных эволюции какого-то квантового объекта, находящегося в стационарном состоянии, например, атома. Пусть объект будет заряженным, например, заряженный e или просто электрон. Одна возможная судьба этого электрона состоит в том, что он просто путешествует из точки A в точку B . Другая судьба интереснее, он проделывает примерно такой же путь, который заканчивается в той же самой точке B . Например, интерференционная картинка, но в одном из плечей интерферометра мы делаем следующую вещь, берем два классических заряда, пусть положительно заряженных, в тот момент как электрон прилетает сюда. Мы подносим их с разных сторон к заряду, делаем так,

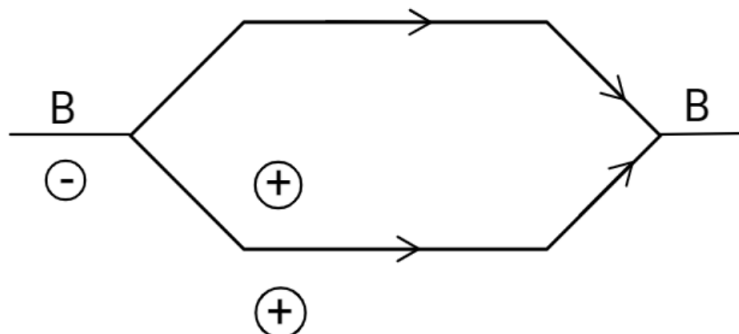


Рис. 5.1. Модель пути электронов

чтобы они летели вместе с зарядом, потом уносим. Электростатический потенциал, который создают эти два заряда, он не равен нулю, а равен он

$$\varphi = \frac{2e_+}{r}$$

где r расстояние, на которое мы поднесли. Потенциальная энергия, это произведение заряда электрона на эти положительные заряды

$$e - \varphi = \frac{2e_+e_-}{r}$$

выбрали так, чтобы энергия была отрицательная и положительная, подносим отрицательное притяжение, значит

$$-e\varphi = \frac{2e_+e_-}{r}$$

значит

$$\Delta E = -e\varphi = \frac{2e_+e_-}{r}$$

если мы посмотрим на фазу которую накрутил этот электрон в то время, как летел по нижнему плечу, у него будет дополнительно намотка фазы, так как мы сдвинули энергию, фазовый множитель вращается с другой скоростью, то дополнительная намотка фазы $\Delta\varphi = \Delta E t$, t - это время которое тут летел. Это совсем мысленный эксперимент привели, так как технически очень трудно два заряда приблизить, но можно организовать, что-то такое же с клеткой Фарадея, в общем, можно такую же вещь экспериментально померять.

Действительно окажется, что есть интерференция двух путей. И интерференция определяется намоткой фазы, вроде ничего удивительного, но удивительное есть. Не зря сказано, что два заряда поднесли, если их поднести аккуратненько с разных сторон, во время всего этого процесса никакие силы на мой электрон действовать не будут. Никаких сил на частицу не подействовало, а что-то с частицей произошло. Это из проявлений, так называемого *эффекта Ааронова-Бома*, который был предсказан в 50-х годах. То есть, совсем не рано, и состоит, на самом деле, буквально в том, что динамика фазы квантовой частицы: а) - измеряется экспериментально; б) - определяется потенциалами, а не силами. С точки зрения классики, это совершенно не тривиальная вещь, потому что потенциал, это не понятно, что. Тем не менее, выясняется, что в квантовом мире потенциал имеет смысл, дает вклад в экспериментально наблюдаемые величины. Лет пять-десять не все физики верили, что так и есть, но потом экспериментальная проверка все подтвердила.

Как было сказано, что, как и в классической физике, выбор начала отсчета энергий произвольный. Можно ли, тем не менее, попытаться найти какой-нибудь абсолютный ноль, от которого отсчитывается энергия. В релятивистской физике есть такой выбор начала отсчета энергии, эта энергия mc^2 . Вот истинный ноль, энергии покоя частицы. Можно ли найти этот ноль в квантовой физике? Оказывается, да,

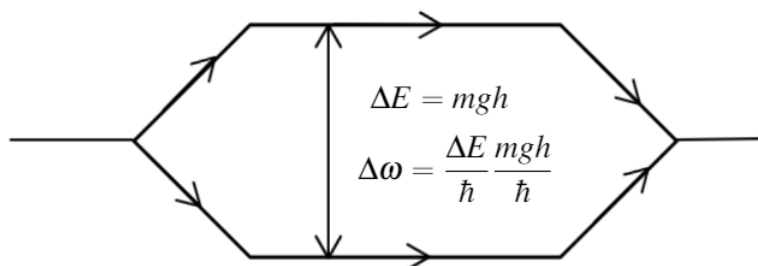


Рис. 5.2. Модель пути частицы в гравитационном поле

точно такой же сценарий, но частица на этот раз движется в гравитационном поле. Разница в энергии гравитационного поля mgh , значит

$$\Delta E = mgh$$

Разница в частотах, соответственно,

$$\Delta \omega = \frac{\Delta E}{\hbar} \frac{mgh}{\hbar}$$

$\Delta \omega$ - это частота, с которой крутится фаза. Вот такие простые формулы - разница гравитационных энергий, разницы частот. Это экспериментально измеряемая величина - разница в частоте.

Обратимся к общей теории относительности в той мере, в которой мы ее знаем. Знаем мы немного, но тем не менее, видимо, известно всем, что в гравитационном поле время течет немножко медленнее. Зададимся частотой ω , из равенства

$$\hbar \omega = mc^2$$

(mc^2 - энергия покоя), будем думать, что фаза крутится именно с такой частотой, и вспомним про релятивистское замедление времени. Релятивистское замедление времени определяется простой формулой, это разница гравитационных потенциалов, то есть $\Delta \omega_{gr}$ равно в общем случае $\frac{MG}{r_1} - \frac{MG}{r_2}$ вблизи поверхности земли равна просто gh ,

$$\Delta \omega = \frac{MG}{r_1} - \frac{MG}{r_2} = gh$$

h , та самая разница в высоте между этими двумя величинами. Значит, относительно изменения частоты,

$$\Delta\Psi = \frac{\Delta\varphi_{ep}}{c^2}$$

это единственная, возможно, незнакомая формула

$$\Delta\Psi = \frac{\Delta\varphi_{ep}}{c^2} = \frac{gh}{c^2}$$

Склеиваем две формулы и получаем

$$\Delta\omega = \frac{mc^2}{\hbar} \frac{gh}{c^2} = \frac{mgh}{\hbar}$$

Видно, что все правда, с точки зрения релятивистской механике действительно абсолютное начало отсчета энергии существует, и в каком-то смысле оно измеримо на столе в лаборатории. В нашем курсе, для нас выбор начала отсчета совершенно произвольной.

Решение стационарного уравнения Шредингера для случая потенциальной ямы

Итак, имеется стационарное уравнение Шредингера, дальнейшая лекция будет посвящена его решению для простейших случаев. Простейший случай, это просто потенциал равный нулю, движение частицы в свободном пространстве.

$$E\Psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \Psi(r)$$

Дифференциальное уравнение не сложно решить, решение будет иметь вид

$$\Psi = e^{\frac{ipr}{\hbar}}$$
$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \forall p$$

Ничего сильно нового, плоская волна, энергия которой определяется очевидной формулой. Плоская волна, которая куда-то движется с произвольным импульсом. В общем нормальное решение, только, к сожалению, не нормируемая. Когда мы записывали что есть волновая функция, то мы начали с того что $\int |\Psi|^2 d^3r$ должен быть равен единице, для плоской волны обеспечить такое условие, разумеется, невозможно на какую константу эту экспоненту не умножать, все равно интеграл расходится по d^3r , получится бесконечность. Значит интеграл написанной величины

$$\int |\Psi|^2 d^3r = \int d^3r = \infty$$

Физически совершенно ясно, что произошло, для того чтобы ничего во времени не менялось, надо чтобы частиц везде было одинаковое количество, вероятность встретить частицу в каждой точке пространства была бы всегда одна и та же, тогда куда бы она не летела, эта вероятность от времени зависеть не будет. Неизбежно получается распределение одинаковое во всем пространстве, этому соответствует плоская волна, но раз никак не ограничена волновая функция, значит и нормировать ее нельзя. Надо собрать волновой пакет, но волновой пакет надо собирать из разных импульсов, он куда-то полетит, свойства будут зависеть от времени этого состояния, но и математически волновой пакет не будет являться решением стационарного уравнения Шредингера с определенной энергией.

Ясно, что надо каким-то образом локализовать частицу в пространстве, ясно, что для этого надо посадить частицу в какую-то потенциальную яму. Классическая частица в потенциальной яме ляжет на дно, про квантовую частицу мы уже подозреваем, по материалу семинарских занятий, что в силу принципа неопределенности, точно на дно она не ляжет, но вероятно какая-то аналогия классического состояния с минимальной энергией все-таки должна быть. Поэтому нужен потенциал, имеющий вид ямы.

Рассмотрим свойства одномерного движения в потенциале, имеющем вид прямоугольной ямы. Яма будет высотой U и шириной $2x_0$, соответственно от $-x_0$ до x_0 . Надо выбрать начало отсчета энергии, в этой задаче, к сожалению, в зависимости от ситуации приходится выбирать одно из двух возможных решений: либо ноль по энергии лежит на уровне края ямы, либо ноль по энергии лежит на дне ямы. Оба случая нужно иметь в виду и между ними асцилировать.

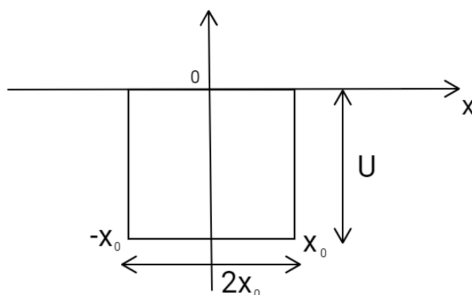


Рис. 5.3. Одномерное движение в потенциале, имеющем вид прямоугольной ямы

Уравнение Шредингера приобретает более сложный вид

$$E\Psi(r) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \Psi(r) + U(r)\Psi(r)$$

Это уравнение мы знаем в классической физике под названием *уравнение движения гармонического осциллятора*

$$M\ddot{x} = -Kx$$

Видно, что это ровно то же самое, тут стоит вторая производная по времени, тут стоит вторая производная по координате, в тех областях где $U = \text{const}$, уравнение в точности совпадают с точностью до замены $\frac{K}{M}$ на $2m \frac{(E-U)}{\hbar^2}$. Соответственно,

$$\begin{array}{ccc} \frac{d^2}{dt^2} & \Longleftrightarrow & \frac{d^2}{dr^2} \\ x & \Longleftrightarrow & \Psi \end{array}$$

таким образом сразу видно чему равно решение уравнения. Это сумма двух экспонент фактически тех же плоских волн

$$\Psi = a_+ e^{i\sqrt{(E-U(r))\frac{2m}{\hbar}}x} + a_- e^{-i\sqrt{(E-U(r))\frac{2m}{\hbar}}x}$$

Можно проверить что это правильно написано просто прямой подстановкой в исходное уравнение Шредингера. Отличие от случая гармонического осциллятора состоит только в том что координата гармонического осциллятора является действительной величиной. Это только в пределах интервалов, внутри которых потенциал - это константа, то есть волновая функция, это сумма экспоненты с плюсом и с минусом. А что делается на границах, как их соединить, как их сшить пока неизвестно.

В каких пределах может лежать ожидаемое значение энергии E . Мы ищем состояния, связанные внутри ямы, локализованные внутри ямы. В классике частица лежала бы просто на ее дне, т.н. легко поверить, что энергия должна быть ниже чем положение края ямы, иначе она улетит на бесконечность и опять ненормируемое решение получится. Величину энергии E мы будем искать между $-U$ и 0 .

В этом случае внутри ямы под корнем стоит $E - U(r)$, $U(r) = -U$, если $|x| < x_0$ и $U(r) = 0$, если $|x| > x_0$. Теперь есть полный набор уравнений, которые надо решать: вид волновой функции, интервал значения энергии и то чему равно U в разных интервалах. Осталось выяснить, во-первых, детали про то, как ведет себя волновая функция в областях вне ямы и, во-вторых, условия сшивки там, где потенциал скачет.

Начнем с области, например $|x| > x_0$. Волновая функция имеет вид

$$\Psi = a_+ e^{i\sqrt{E}}$$

E - отрицательная величина, вместо осциллирующей экспоненты получается спадающая либо растущая, зависит от того, какую ветвь значений корня мы выберем. Выбирать нам не надо, так и так два слагаемых. Поэтому для единообразия обозначения пишем

$$\Psi = a_+ e^{\sqrt{2m|E|}\frac{r}{\hbar}} + a_- e^{-\sqrt{2m|E|}\frac{r}{\hbar}}$$

При удалении в бесконечность одно из слагаемых нарастает экспоненциально быстро, другое слагаемое экспоненциально быстро падает. Совершенно ясно, что слагаемое, которое растет. E - отрицательная величина, при взятии корня из отрицательной величины появилась еще одна мнимая единица и соответственно экспонента стала обычной действительной. Экспоненциально растущая вверх физического смысла не имеет, потому что, если это решение оставить, то никакой нормировки квадрата модуля Ψ на единицу заведомо не получится. По этому поводу необходимо потребовать $a_+ = 0$ и в положительной области вне ямы волновая функция - это экспоненциально быстро спадающая величина.

$x < -x_0$ - точно такие же две экспоненты, используем букву c на этот раз, для обозначения амплитуды букву b . В этом случае ясно, что для того чтобы решение имело смысл, надо выбрать экспоненту с плюсом, она при движении на минус бесконечность будет уходить в ноль, соответственно

$$c_+ e^{\sqrt{2m|E|}\frac{r}{\hbar}}$$

А в середине оставляем обе экспоненты, они получатся обе осциллирующие

$$b_- e^{-i\sqrt{2m(E+U)}\frac{r}{\hbar}} + b_+ e^{i\sqrt{2m(E+U)}\frac{r}{\hbar}}$$

Что делается в точках где потенциал испытывает скачок? И на этот вопрос ответ из классической механики мы уже знаем. Скачок потенциала, скачок U - это резкое изменение, мгновенное во времени изменение величины силы, действующей на классический осциллятор. Если резко скачком поменялась сила, то скачком поменяется ускорение, вторая производная координата. Ни сама координата, ни скорость при этом резко не поменяются, они останутся непрерывными. Условие непрерывности в точке скачка потенциала, если этот скачок конечный - это непрерывность волновой функции и ее первой производной.

Там где потенциал испытывает скачок $U(r)$ в точке x_0 , волновая функция не меняется

$$\Psi(x_0 - 0) = \Psi(x_0 + 0)$$

это стандартный простой способ написания бесконечно малых.

$$\frac{d}{dr}\Psi(x_0 - 0) = \frac{d}{dr}\Psi(x_0 + 0)$$

Запишем как это выглядит в точке x_0 :

$$b_- e^{-i\sqrt{2m(U+E)}\frac{x_0}{\hbar}} + b_+ e^{i\sqrt{2m(U+E)}\frac{x_0}{\hbar}} = a e^{-\sqrt{2m|E|}\frac{x_0}{\hbar}}$$

Второе уравнение - если взять производную по r посмотрим сначала что произойдет внешне? будут выскакивать соответствующие множители перед экспонентами, так и напишем

$$i\frac{\sqrt{2m(E+U)}}{\hbar} \left(b_- e^{-i\sqrt{2m(U+E)}\frac{x_0}{\hbar}} + b_+ e^{i\sqrt{2m(U+E)}\frac{x_0}{\hbar}} \right) = \frac{-\sqrt{2m|E|}}{\hbar} a e^{-\sqrt{2m|E|}\frac{x_0}{\hbar}}$$

Выписаны два уравнения на правой границе, на правом краю ямы, точно также два уравнения можно писать на левой границе.

Перед нами система из четырех линейных однородных уравнений относительно четырех коэффициентов a , c и два коэффициента b с параметром E , фактически с пятой переменной. Математически надо найти такое значение E , при котором эта система из четырех линейных однородных уравнений имеет нетривиальное решение. Фактически детерминант соответствующий матриц четыре на четыре должен обратиться в ноль. Тогда будут нетривиальные решения, будет некая линейная связь между коэффициентами и сами значения коэффициентов потом можно будет найти из условия нормировки.

Туннелирование. Бесконечно глубокая яма. Дискретный спектр

Обратим внимание на новую интересную физику, которая тут неявным образом появилась. В решении общего вида коэффициенты a и c конечно не равны нулю. Видно, что если яма конечной глубины, есть некая спадающая экспонента. Частица в квантовом случае не полностью сосредоточена внутри ямы, вероятность обнаружить

ее квадрат волновой функции вне ямы экспоненциально быстро падает, по мере того как мы от ямы уходим, но тем не менее факт есть факт, даже если мы говорим о локализованной в яме частице, вероятность обнаружить частицу вне ямы не ноль. Это один из самых ярких квантовых эффектов *туннелирования*

Рассмотрим простой предельный случай, в котором туннелирования, к сожалению, нет, выхода за пределы ямы нет. Случай очевидный - бесконечно глубокая яма. Энергия отсчитанная относительно дна ямы мала, по сравнению с высотой ямы, если говорить про физику. Надо ноль отчета энергий расположить на дне ямы и энергию отсчитывать от этого нуля. Энергия становится положительной и одна яма отчитывается. Яма бесконечно глубокая, значит величина глубины ямы в ответ войти не должна.

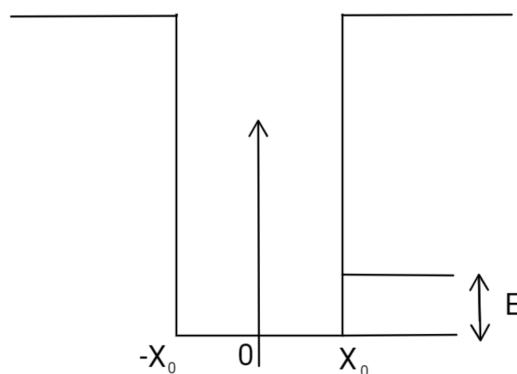


Рис. 5.4. Бесконечно глубокая яма

Посмотрим на то, что в этом пределе происходит с коэффициентами. Мы сдвинули на U шкалу отчета энергий, поэтому там где был модуль E теперь будет модуль $|U - E|$, а там где было $U + E$ теперь будет E . Посмотрим справа, стоит $\sqrt{(U_E)}$, E - величина не очень большая U мы хотим стримить к бесконечности, слева, после того как мы переписали U нигде нет, везде стоят величины конечные, как уничтожить эту бесконечность $\sqrt{U}$? Экспонента конечно поможет, надо сказать, что

$$ae^{-\sqrt{2m|E|}\frac{x_0}{\hbar}} = 0$$

тогда такая же конструкция, стоящая сверху, обращается в ноль.

Волновая функция экспоненциально быстро спадает и каким-то образом осциллируют, пока неизвестно каким, и дальше тоже экспоненциально спадает. Чем U больше, тем производная больше. Единственный способ удержать конечную производную - это занулить волновую функцию. Когда большая величина левой части

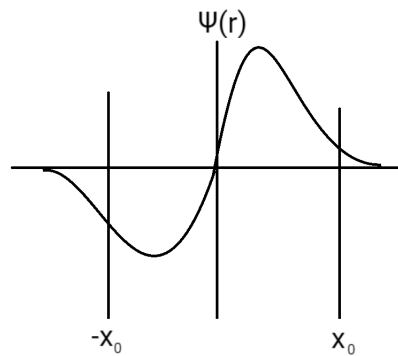


Рис. 5.5. Волновая функция в бесконечно глубокой яме

будет обеспечено просто малостью знаменателя, производная останется конечной. По мере того как мы увеличиваем, все больше и больше эти хвосты давим, даже квантовой частице за бесконечный потенциал вылезти тяжело, и в пределе U стремится к бесконечности, туннелирование прекращается, частица вся целиком заперта внутри ямы. Математически это соответствует простому условию - Ψ на границе равно нулю.

$$\Psi(\pm x) = 0$$

$$-x_0 < r < x_0$$

$$\Psi(r) = b_+ e^{i\sqrt{2mE}\frac{r}{\hbar}} + b_- e^{-i\sqrt{2mE}\frac{r}{\hbar}}$$

Как для найденной известной формы решения удовлетворить эти простые граничные условия? Например, можно взять $b_+ = b_-$, тогда

$$\Psi = 2b \cos \sqrt{2mE} \frac{r}{\hbar}$$

Построим график косинуса, у косинуса есть нули, первый ноль находится в точке $\frac{\pi}{2}$, второй ноль находится в точке $\frac{3\pi}{2}$ и так далее. Все, что таким образом надо сделать, это выбрать значение энергии так, чтобы в одной из этих точек оказаться в случае, когда $r = x_0$, косинус - функция чётная, поэтому автоматически на обеих границах получим зануления волновой функции.

$$\frac{\sqrt{2mE_{n_c}}}{\hbar} x_0 = \frac{\pi}{2} + n_c \pi$$

$$n_c = 1, 2, 3, \dots$$

Возьмем нечетное решение $b_+ = -b_-$, тогда

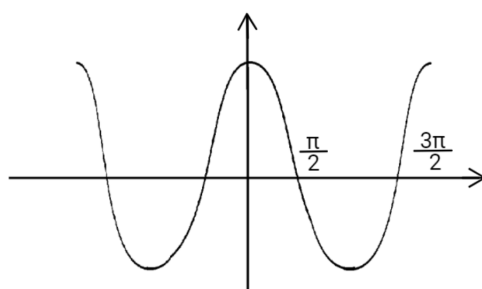


Рис. 5.6. График косинуса

$$\Psi = 2b \sin \sqrt{2mE} \frac{r}{\hbar}$$

У синуса нули в точках $\pi, 2\pi, \dots$. Получается

$$\frac{\sqrt{2mE_{n_s}}}{\hbar} x_0 = \pi n_s$$

$$n_s = 1, 2, 3, \dots$$

Видно, что формулы можно объединить, введя индекс n , возведем в квадрат и найдем значению n

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mx_0^2} * \left(\frac{\pi}{2}n\right)^2$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Вот полный набор решений одномерного уравнения Шредингера для бесконечно глубокой потенциальной ямы. Можно посмотреть и увидеть, что синусами и косинусами весь набор решения ограничивается, неверящие могут попробовать самостоятельно рассмотреть произвольного вида b_+ и b_- и увидеть, что одновременно два граничных условия удовлетворить не удастся. Значит тут, соответственно, нечетное n соответствует косинусам, четное соответствует синусам. Спектр связанных состояний, спектр - это набор энергий, для стационарного уравнения Шредингера оказался дискретным. Возможное решение образует дискретный ряд значений.

Это находится выразительном контрасте с тем, что мы видели для частицы в свободном пространстве, там энергия равнялась $\frac{p^2}{2m}$ и p - это произвольное число. Энергия пробегает непрерывный ряд значений, любая величина из положительных чисел. Эта ситуация общего плана, по математическим причинам способ поиска решения, определения условий на бесконечности. Уравнение Шредингера дает дискретный ряд

значений, если речь идет о связанных состояниях, непрерывный ряд значений, если речь идет о состояниях соответствующих частице, которая улетает на бесконечность либо прилетает на бесконечность. Соответственно, принято говорить о дискретном и непрерывном спектре решений.

До сих пор непонятно было, как же так в атоме Бора значения энергий конечные. А мы знаем, что когда электрон в свободном пространстве летит, никакой дискретизации нет. Вот ответ - в атоме речь идет о решениях дискретного спектра, в свободных пространствах речь идет о решениях непрерывного спектра.

В квантовой механике энергия меняется порциями, если речь идет о переходах между состояниями дискретного спектра, а если непрерывное пространство, то непрерывным образом меняется.

Симметрия волновых функций

Косинус - функция чётная по замене x на $-x$, синус - функция нечетная. Таким образом, найденные нами решения - либо четная функция, либо нечетная. По определению четная функция - это

$$\Psi(x) = \Psi(-x)$$

а нечетная - это

$$\Psi(x) = -\Psi(-x)$$

Если взять какую-то функцию x наугад, то конечно она не будет ни четной ни нечетной. Тот факт, что в получившемся решении классифицируются по четности, это не случайность, а следствие того, что потенциал, с которым мы работаем, сам обладают четность

$$U(x) = U(-x)$$

такая классификация присутствует всегда, это легко показать. Пусть есть некоторое решение стационарного уравнения Шредингера $\Psi(x)$ -решение УШ, подставим тогда в уравнение Шредингера $\Psi(-x)$,

$$\hat{H}\Psi(-x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(-x) + U(x)\Psi(-x) = E\Psi(-x)$$

Наким образом если $\Psi(x)$ - решение, то $\Psi(-x)$ - тоже решение. Мы видели на примере решений для бесконечно глубокой потенциальной ямы, что каждому уровню

энергии соответствует только одна волновая функция, в одноймерье это всегда так. Для одномерного уравнения Шредингера вырождения не бывает, каждому уровню энергии соответствует одна и та же волновая функция, значит $\Psi(x)$ и $\Psi(-x)$ - это одно и то же, с точностью, конечно, до фазового множителя.

$$\Psi(-x) = e^{i\phi} \psi(x)$$

Чему равен этот фазовый множитель тоже легко понять. Еще раз перевернем знак координаты

$$\Psi(-(-x)) = e^{i\phi} \psi(-x)$$

$$\Psi(-(-x)) = \Psi(x)$$

Таким образом, дважды подействовал оператор инверсии, то есть дважды домножим на множитель $e^{i\phi}$, волновую функцию переводим саму себя $e^{i\phi} * e^{i\phi} = 1$, это возможно только при $e^{i\phi} = \pm 1$

То обстоятельство, что волновые функции бывают или чётные, или нечётные радикально упрощает поиск решения. Если вернуться к системе из четырех уравнений с четырьмя коэффициентами, то становится ясно, что эта система в таком общем виде не нужна, избыточна, надо сразу договориться о том, что волновые функции бывают либо четными, либо нечетными, тогда соотношение четности из четырех коэффициентов оставит два.

Четностью удел не ограничивается, в общем случае, если потенциал обладает той или иной симметрией, эта симметрия отражается в классификации волновых функций, в классификации решений стационарного уравнения Шредингера. Они классифицируются по неприводимым представлениям соответствующей группы.

Мы увидим более сложную симметрию, чем по четности, когда будем работать с атомами, известное из химии количество электронов уместающийся на определенной орбитали - это ничто иное, как следствие симметрии, в сферических случаях - симметрии потенциала. Четкость потенциала что-то значит, именно она, с точки зрения даже просто решения задач, сильно упрощает жизнь.

Лекция 6. Простейшие модели квантовой механики

Повторение материала предыдущей лекции

В прошлый раз мы говорили про стационарное уравнение Шредингера, которое определяет, соответственно, свойства стационарных состояний, свойства, которых не зависят от времени

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

где $\hat{H}$ - это оператор Гамильтона. И начали говорить про состояние дискретного и непрерывного спектра. Состояние непрерывного спектра, соответствует свободному движению частицы, которая может уходить на бесконечность. Состояние дискретного спектра соответствует локализованным физическим состояниям, когда частица заперта внешним потенциалом. Рассмотрели в качестве простейшего случая частицу в бесконечно глубокой прямоугольной яме, нашли спектр, после чего, не проводя явных выкладок, качественно поговорили о том, как выглядят состояния квантовой частицы в одномерной прямоугольной яме конечной глубины. Рисуем края ямы,

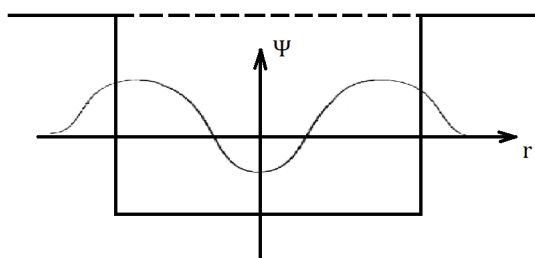


Рис. 6.1. Частица в глубокой яме

ноль, энергетический уровень. Внутри ямы несколько периодов синуса, вне ямы экспоненциальный спад волновой функции. Начали уже говорить о том, что тот факт, что есть ненулевая вероятность частицу обнаружить за пределами ямы, это новое чисто квантовое явление, связанное с волновой природой квантовых объектов. Проникновение в классически запрещенные области.

Эффект туннелирования. Экспериментальное обнаружение

Естественный вопрос, как экспериментально обнаружить эффект туннелирования? На каком-то расстоянии от ямы потенциал опять опустим, дав возможность частице с энергией, соответствующей связанному состоянию, свободно путешествовать в этой области пространства. Почти естественный ответ, глядя на эту картинку,

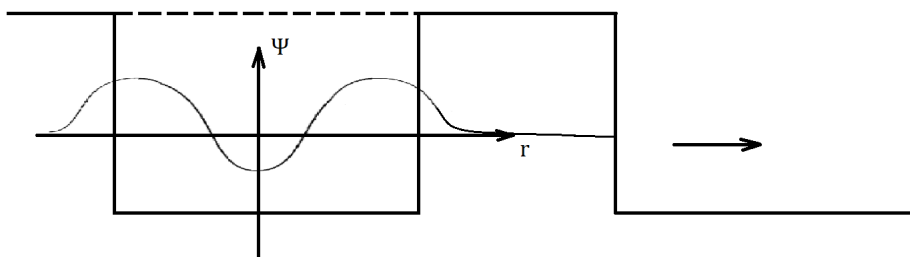


Рис. 6.2. Возможность частицы с энергией, соответствующей связанному состоянию, свободно путешествовать в области пространства

раз волновая функция не обращается в ноль, в классически запрещенной области, есть вероятность, что частица доберется до правого на нашей картинке картинке края, потенциального барьера, который запрещает ей выйти и на бесконечность сетки улетит. Сразу из нарисованной картинке видно, что это вероятность мала, спадает. Помним по формулам, что спадает экспоненциально быстро под барьером волновая функция, поэтому если ширина барьера хоть сколько-нибудь велика, то вероятность туннелирования оказывается экспоненциально маленькой. Зато можно подождать. Вероятность, это же не точное выражение, надо говорить о вероятности в единицу времени, о скорости туннельного испарения частицы из этой потенциальной ямы. Соответственно, эту экспоненту надо еще как-то сравнивать с характерным временем, определяемой энергии и так далее. В общем, тут есть о чем поговорить в смысле экспериментальной реализации.

Есть весь инструментарий для того, чтобы рассчитать точно вероятность туннелирования в нарисованном потенциале. Надо в четырех областях написать волновую функцию. Она будет иметь вид спадающей экспоненты в левой области, суммы двух волн, бегущей направо и налево в середине, суммы двух экспонент (никто не гарантировал, что нет экспоненты вот такой, спадающей отсюда под барьером) и наконец, убегаящей на бесконечность частицы в правой области, потому что источника никакого частиц здесь нет в районе экрана, соответственно, только волна, которая бежит на право должна быть взята. Итого, получается шесть уравнений симметрии, никакой особенной тут задачи нет. Надо записать шесть уравнений на трех границах, выразив условие непрерывности волновой функции и ее производной, и посмотреть какие решения получатся.

Задача о потенциальной яме произвольного вида. Приближение ВКБ. Вероятность туннелирования в единицу времени

Рассмотрим более общую задачу о потенциале произвольного вида. Есть яма, точно так же в ней есть частица, не известно как выглядящая волновая функция.

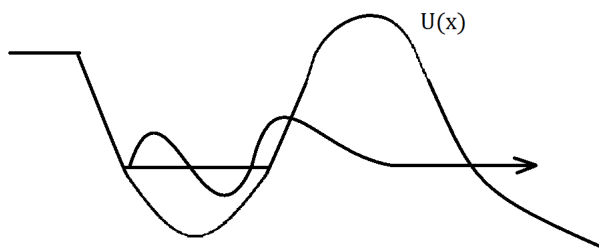


Рис. 6.3. Частица в яме с неизвестной волновой функцией

Физически, это должно иметь место и в случае общего плана, потому что волновые функции устроены как-то по-другому, но если видим, что частица может проникать под барьер, не видно никаких причин, почему в общем случае под барьер конечной глубины квантовая частица не может пролезть, не важно, какая у этого барьера форма. Таким образом, если говорить про эту задачу, то тут потенциал $U(x)$, и для потенциала произвольного вида уравнение Шредингера на бумаге не решается, есть, однако, хорошее приближение. Хорошее для такого рода задач, называется оно *WKB* — *приближение Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна*, по именам авторов.

Познакомимся с этим приближением. Как выглядит волновая функция, если потенциал константа, если $U = \text{const}$, то

$$\Psi = \Psi e^{i\sqrt{2m(E-U)}\frac{x}{\hbar}}$$

Теперь напишем выражение для волновой функции в приближении *WKB*

$$\Psi = \Psi_0 e^{i\int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m(E-U(x))} dx}$$

Видно, что похожее выражение, в приближении *WKB* на то, что мы знаем по случаю непрерывного потенциала. Это волновая функция, которая в каждой точке думает, что потенциал от координаты не зависит. Тогда интеграл dx если $U = \text{const}$ сразу превращается в то, что мы знаем, всё нормально. То, что рассмотрели, это не формулировка приближения, а некое «рукомашество», выражение ничего не думает.

Более аккуратная формулировка состоит в том, что выписанное приближение верно, если считать, что потенциал в пространстве изменяется гораздо медленнее, чем волновая функция. Посмотрим, чему это соответствует на практике. Волновая функция должна удовлетворять стационарному уравнению Шредингера, таким образом, должны посчитать вторую производную. Гамильтониан

$$E\Psi = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi + U(x)\Psi$$

Надо вторую производную вычислять. Первая производная $\frac{d}{dx}\Psi$ - производная от экспоненты, это сама экспонента на производную показателя, а производная показателя, это производная интеграла по верхнему пределу, значит, подынтегральное выражение.

$$\frac{d}{dx_1} \Psi(x_1) = \Psi_0 \frac{i\sqrt{2m(E-U(x_1))}}{\hbar} e^{i\int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m(E-U(x))} \frac{dx}{\hbar}}$$

Вычислим вторую производную, при этом практически можно применить то приближение, которое озвучено выше. При вычислении второй производной два слагаемых. Во-первых, надо продифференцировать экспоненту, выскочит второй раз такое же выражение, во-вторых, нужно $U(x)$ продифференцировать, но мы постулировали, что хотим рассматривать ситуацию, когда $U(x)$ меняется медленнее, чем волновая функция. Математически, это как раз соответствует условию, что производная $U(x)$ пренебрежимо мала по сравнению с производной от экспоненты, которой волновая функция равна. Поэтому из двух слагаемых, выписываем одно, дифференцируем только экспоненту

$$\frac{d^2}{dx_1^2} \Psi(x_1) \stackrel{!}{\approx} \Psi_0 \frac{-2m}{\hbar^2} (E - U(x_1)) e^{i\int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m(E-U(x))} \frac{dx}{\hbar}} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x_1)) \Psi(x_1)$$

Если, это выражение подставить в уравнение Шредингера, которое написано, то как раз остальная часть $E\Psi - U(x)\Psi$ все уничтожится тем, что написали. Итак, в приближении, что потенциал меняется медленно, мы волновую функцию умеем записать. Есть много тонкостей, есть две экспоненты, бегущая направо, бегущая налево, конечно надо как-то особые точки обрабатывать, тем не менее, нам хватит имеющегося выражения. Если внимательно на него посмотреть, то можно увидеть, что в подбарьерной области, где энергия меньше чем $U(x)$, оно тоже применимо, там корень оказывается чисто мнимым, соответственно, волновая функция перестает осциллировать, начинает экспоненциально спадать, и величина, на которую она экспоненциально спадает определяется интегралом в подбарьерной области. Обо-

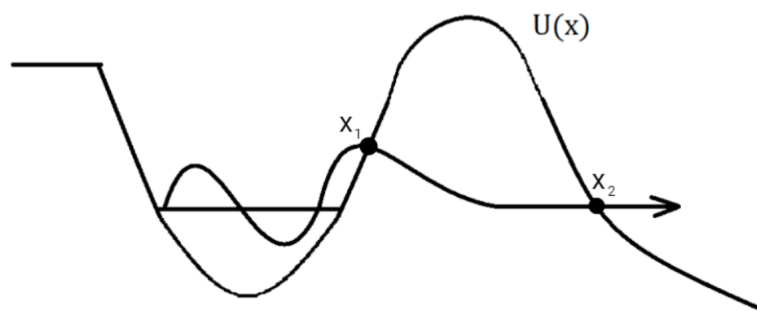


Рис. 6.4. Частица в яме

значим x_1, x_2 , напомним, что волновая функция

$$\Psi \propto e^{-\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x)-E)} \frac{dx}{\hbar}}$$

Если внутри ямы, на ее правом краю волновая функция порядка единицы, то на правом краю потенциала на левом краю, соответственно, разрешенной области, куда частицы улетают, волновая функция экспоненциально мала, но присутствует, примерно определяется такой экспонентой. Вероятность туннелирования в единицу времени, вероятность найти частицу сразу после барьера, p пропорциональна квадрату этой волновой функции, значит, если выписать явную форму зависимости для частицы, туннелирующей через потенциальный барьер прямоугольной формы, и будет видно, что вот такая асимптотика действительно получается.

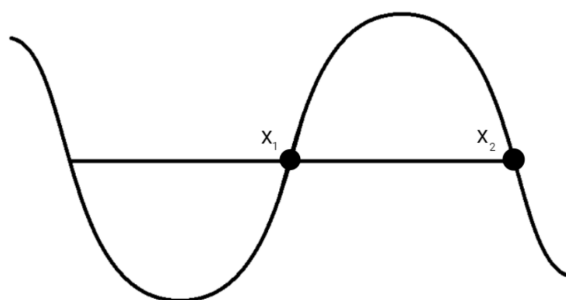


Рис. 6.5. Явная форма зависимости для частицы

$$p \propto e^{-2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x)-E)} \frac{dx}{\hbar}}$$

Туннелирование релятивистских частиц. Парадокс Клейна

Формула, которая получена для классического закона дисперсии $\frac{p^2}{2m}$. Если рассмотреть другой закон дисперсии, то и формула будет другая. В частности, если рассмотреть, то как туннелируют релятивистские частицы, выяснится, что туннелируют они по-другому. В пределе очень большой энергии они туннелируют гораздо легче. Это обстоятельство, которое известно тоже с 30-х годов под названием парадокса Клейна, оно неожиданно оказалось важным в физике конденсированного состояния, когда лет пятнадцать назад синтезировали графен. Обнаружили, во-первых, электроны в нем похожи на ультрарелятивистские электроны из ядерной физики, во-вторых, что они действительно по этому поводу не замечают никаких препятствий, то есть, обладают сверх высокой мобильностью.

Альфа-распад нестабильных ядер. Закон Гейгера-Нетолла

Но и на классическом уровне эта формула совершенно замечательная, и замечательность эту показал Гамов в 1928 году. Георгий Гамов на тот момент советский физик, потом он уехал, когда сумел на основе представлений о туннелировании объяснить закономерности α распада нестабильных ядер известные, как закон, установленный эмпирически, как закон Гейгера-Нетолла. Во-первых, что такое не стабильное ядро. Среди множества ядерных реакций есть обширный класс, когда никаких превращений с переходом, например, нейтрона в электрон и протон не происходит, число и тип нуклонов остаются одинаковыми, а ядро просто разваливается на две части. Это возможно если есть дефект масс. Если сумма масс частей, на которую, развалилось ядро меньше чем масса ядра исходного, нестабильного, тогда дефект масс по формуле mc^2 превращается в энергию разлетающихся частиц. И часто встречающийся и наиболее простой тип такого распада на две части, это α -распад. Процесс, при котором из массивного ядра вылетает ядро гелия, α -частица, состоящая из двух протонов и двух нейтронов. Есть какое-то ядро с большим зарядом z и разваливается на два кусочка: α -частица и $z - 2$ заряд.

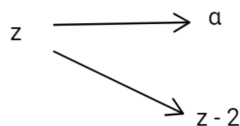


Рис. 6.6. Ядро с большим зарядом z и разваливается на два кусочка: α -частица и $z - 2$ заряд

В нижней части таблицы Менделеева изотопов у каждого из элементов много.

Есть серии, когда существуют, могут быть выделены, но при этом являются нестабильными по отношению к α -распаду сразу несколько изотопов одного и того же атома. Люди исследовали, как для таких серий устроена зависимость времени жизни изотопа от энергии, с которой эта α -частица вылетает, фактически от дефекта масс. 1911 год, то есть задолго до формулировки квантовой механики, зависимость Гейгера-Нэттолла была установлена. Выяснилось, что зависимость для всех таких серий единообразная. Время жизни оказывается пропорционально экспоненте, некая константа B деленная на корень из E - это энергия, с которой α -частица вылетает.

$$\tau \propto e^{\frac{B}{\sqrt{E}}}$$

Надо сказать, что зависимость экспоненциальная и разброс, в котором лежат времена жизни огромный, то есть энергия, с которой вылетает α -частица, она условно говоря, в пределах серии варьируется от трех до шести мега электрон-вольт, то есть в пару раз, а время жизни меняется от секунды до часов, то есть на несколько порядков. Очень фактурный результат, ясно было, что какая-то простая физика за такой универсальной для всех атомов зависимостью лежит, но какая именно понять было невозможно, потому что про ядерные силы ничего не знали. После того как была принята модель атома по Резерфорду стало ясно, что есть ядро, там есть нейтроны и протоны. И, как говорится что, ясно что их, наверное, какой-то неизвестной природы силы там удерживают, как оттуда такую простую формулу извлечь неясно. Гамов обратил внимание на то, что когда ядро только что распалось, когда α -частица еще поблизости от него находится, то она находится в кулоновском поле ядра и свойства этого клоунского поля хорошо известны. Частица положительно заряжена, ядро тоже положительно заряжено - это *кулоновский потенциал отталкивания*.

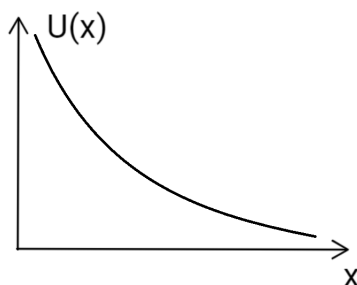


Рис. 6.7. Кулоновский потенциал отталкивания

Кулоновский закон

$$U(x) = \frac{2(z-2)e}{x}$$

Нарисовали одномерье, в трехмерье просто задача со сферической симметрией. Заряд того, что вылетает, заряд того, что осталось делить на расстояние между ними. Где-то тут, при очень маленьких x , по-видимому, есть потенциал притяжение, который удерживает вместе частицы, находящиеся в ядре, но заметную часть потенциала мы знаем. Мы знаем энергию, с которой частица вылетела E , ну либо если другой изотоп какая-то другая энергия - E' .

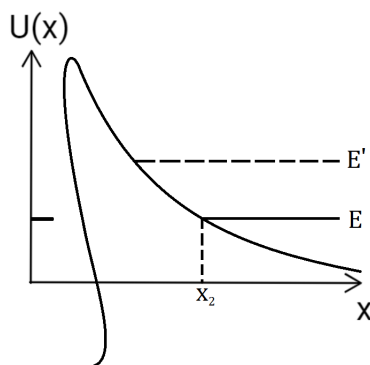


Рис. 6.8. Кулоновский потенциал отталкивания

Мы знаем $U(x)$, мы знаем энергию, просчитаем коэффициент туннелирования.

$$p \propto e^{-2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2M(\frac{2}{x}(z-2)e^2 - T)} \frac{dx}{\hbar}}$$

$$M = 4M_p \text{ массы протона}$$

Надо взять такой интеграл, для того, чтобы взять, надо обезразмерить. Выпишем его, от E избавимся сразу, чтоб единицу вычитать.

$$\frac{2\sqrt{E}}{\hbar} \int_0^{x_2} \sqrt{2M(\frac{2}{x} \frac{(z-2)e^2}{E} - 1)} dx =$$

В качестве нового x , берем x деленое на $\sqrt{2M(\frac{2}{x} \frac{(z-2)e^2}{E} - 1)}$, обозначим его за y ,

$$y = \frac{xE}{4M(z-2)e^2}$$

Тогда получается

$$\frac{2\sqrt{E}}{\hbar} \int_0^{x_2} \sqrt{2M(\frac{2}{x} \frac{(z-2)e^2}{E} - 1)} dx = \frac{2\sqrt{E}}{M} \frac{4M(z-2)e^2}{E\hbar} \int_0^{y_2} \sqrt{y^{-1} - 1} dy$$

Важно следующее. Во-первых, интеграл при нуле сходится, вблизи нуля под интегралом стоит выражение вида единица делить на корень из y . Во-вторых, интеграл можно взять, но не нужно. Это некая константа, никак от энергии не зависящая то, что написано под интегралом ни от чего не зависит, и верхний предел, это просто точка обращения подынтегрального выражения в ноль - это некая константа. И все буквы то же, на самом деле никакая не важна, кроме единственной буквы E , которая присутствует в виде $\frac{\sqrt{E}}{E}$, то есть $\frac{1}{\sqrt{E}}$

$$p \propto e^{-2 \int_{x_1 \approx 0}^{x_2} \sqrt{2M(\frac{2}{x}(z-2)e^2 - T)} \frac{dx}{\hbar}} \propto e^{-\frac{B}{\sqrt{E}}}$$

Вот закон α -распада, закон Гейгера-Нетолла. Константа B , в принципе, тут написана. y от E не зависит. E , которая в определении y входила, на самом деле к y отношения не имеет, подынтегральные немые переменные, если только пределы интегрирования тоже ни от чего не зависят, могут обозначаться любыми буквами.

Результат закона Гейгера-Нетолла очень значимый, он и так написано интересно выглядит, он еще интереснее оказывается если посмотреть внимательно на экспериментальные данные, увидеть тонкие детали этой зависимости, связать их с тем, что интегрирование идет не от нуля, а от радиуса действия ядерных сил, и, таким образом, оценить размеры ядра. Это удастся сделать, это была одна из первых оценок размера ядер. С точки зрения общей физической тоже очень значимый интересный результат, произвел большое впечатление на физическое сообщество, потому что, во-первых, первое явное проявление туннелирования, во-вторых, для ядерной материи, про которую вообще ничего не было известно. То, что электроны ведут себя квантовым образом, подчиняются уравнению Шредингера понятно, к этому уже привыкли. А тут α -частицы, вблизи ядра на них ядерные силы действуют, массы совсем другие, не как у электронов. Значительное серьезное расширение области применимости квантовой механики. Таким блестящим образом, вошла формула WKB в квантовую физику. Поскольку все-таки не ядерная физика, то важным в том, что рассказано является, в первую очередь, сами выражения для коэффициента туннелирования и понятия туннелирования.

Модель гармонического осциллятора. Анология с ЭМ полем.

Спектр квантового гармонического осциллятора

Переходим от разговоров о достаточно искусственном прямоугольном потенциале, с точностью до отступления на общую, но приближенную формулу WKB , к разговору о гармоническом осцилляторе. От модели прямоугольного потенциала модель

гармонического осциллятора выгодно отличает то, что гармоническими осцилляторами с хорошей точностью в природе являются очень многие системы.

Вспомним механику. В механике почти любая система в области малых колебаний, в области вблизи равновесия представляет собой гармонический осциллятор. В квантовой механике это не совсем так. Как мы уже знаем принцип неопределенности требует, чтобы квантовая система не находилась непосредственно в нижней точке потенциала, а надо чтобы совершала нулевые колебания. Значит надо, чтобы аппроксимация потенциала посредством первых двух членов ряда Тейлора хорошо работала в области, этих самых нулевых колебаний, но и таких систем конечно очень много. Часть из них мы затронем в ходе нашего курса, а сейчас важно упомянуть самую распространенную из таких систем, это моды электромагнитного поля. Моды электромагнитного поля являются гармоническими осцилляторами. Этот тезис требует пояснений, потому что массы никакой нет, масса покоя фотона равна нулю, есть электрическое и магнитное поля. О каком же гармоническом осцилляторе идет речь? На самом деле ничего страшного, что нет массы, как мы увидим, она и необязательно входит в ответ.

Важнейшим свойством гармонического осциллятора является его линейность, которая экспериментально выражается вне зависимости частоты колебаний от амплитуды этих колебаний. Если взять физический маятник и вспомнить школьную программу, то ясно, что у него период колебаний в области малых колебаний не зависит от того, как сильно его раскачивать, то есть не зависит от частоты. А если мы совсем сильно раскачаем, то зависимость уже появится. В области малых колебаний период действительно не зависит от частоты, это и есть та область, где модель гармонического осциллятора применима.

Практический способ проверить, является ли система гармоническим осциллятором или нет – это именно проверить, нет ли зависимости частоты от того, как сильно мы это осциллятор раскачали. Когда электромагнитное поле в вакууме, сколько не качай, сколь бы сильное поле лазером не создавай, свойства вакуума от этого не меняются, закон дисперсии ω от k от этого не меняется. Так коэффициентом пропорциональности скорость света и останется, она никак не зависит от амплитуды световой волны. Математически для классической электродинамики это выражается в линейности уравнений Максвелла, а физически несложно померить, что скорость света от длины волны и от амплитуды этой волны не зависит.

Таким образом, вакуум – это совокупность практически идеальных гармонических осцилляторов с точки зрения электромагнитного поля. Этих осцилляторов очень много, для каждого волнового вектора свой, и не один, а два, потому что есть два значения поляризации. Гармонический осциллятор – это самая распространенная

по этому поводу модель квантовой механики во вселенной. Вторая по распространенности – это атом водорода. После вступления, которое было признано показать, что гармонический осциллятор, это очень жизненная модель, с ним начнем работать.

Напишем уравнение для привычного из механики случая — масса в квадратичном потенциале, соответственно и в этот момент вводим в ход операторные обозначения, соответственно

$$E\Psi = \frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2\Psi$$

где $\hat{p}$ соответствует $-i\hbar\frac{d}{dx}$, а $\hat{x}$ - x / Нарисуем параболическую яму Сразу видно

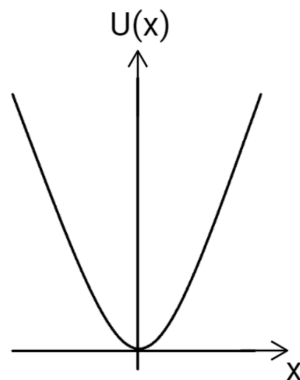


Рис. 6.9. Параболическая яма

важное свойство этого потенциала, ни о каких волновых функциях непрерывного спектра речь идти не может, как бы высоко мы по энергии не поднялись, везде будут берега этого периодического потенциала. Частица заперта, таким образом, все состояния являются состояниями дискретного спектра. Найдем их. Найдем одно из них, которое, на самом деле, соответствует основному состоянию, состоянию с минимальной энергией. Найдем методом подстановки, то есть зная, как выглядят решения, убедимся в этом

$$\Psi_{n=0} = \alpha e^{-\frac{\kappa x^2}{2}}$$

И подставим такую форму в уравнение Шредингера. Считаем производное

$$\frac{d}{dx}\Psi_{n=0} = -\alpha \kappa x e^{-\frac{\kappa x^2}{2}}$$

Чтобы непропорциональность вести далее, ввели коэффициент α . Дифференцируем два члена и получаем

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi_{n=0} = -\alpha\kappa e^{-\frac{\kappa x^2}{2}} + (\alpha\kappa^2 x^2 e^{-\frac{\kappa x^2}{2}})$$

Дифференцируем два члена и получаем

$$-\alpha\kappa e^{-\frac{\kappa x^2}{2}} + (\alpha\kappa^2 x^2 e^{-\frac{\kappa x^2}{2}}) = (-\kappa + \kappa^2 x^2)\Psi_{n=0}$$

Получилось ровно то, что надо. Член со второй производной дает слагаемое пропорциональное Ψ , оно должно уничтожить левую часть $E * \Psi$, и дает слагаемое пропорционально $x^2 * \Psi$, оно как раз уничтожит квадратичный потенциал, надо только коэффициент определить.

$$\begin{aligned}\frac{p^2}{2m}\Psi_{n=0} &= \frac{\hbar^2}{2m}(\kappa - \kappa^2 x^2)\Psi_{n=0} \\ \frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2 &= \frac{m\omega^2}{2} \implies \kappa = \frac{m\omega}{\hbar}\end{aligned}$$

Первый член

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\kappa = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Новые в этих формулах только численные коэффициенты. И характерную величину энергии основного состояния, и квадрат дисперсии координаты в основном состоянии, мы знаем из соотношений неопределенности. Теперь математически точный результат для волновой функции

$$\begin{aligned}\Psi_{n=0} &= \dots e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ E_{n=0} &= \frac{\hbar\omega}{2}\end{aligned}$$

То, что обозначили тремя точками и то, что было обозначено буквой α - это нормировочный коэффициент, который находится с условием $\int \Psi^2 dx = 1$, который конечно можно посчитать, это Гауссов интеграл. Как далеко можно продвинуться на этой дорожке? Легко найти следующий уровень, для этого надо искать волновую функцию в виде x умножить на эту же самую экспоненту, тоже получится решение, соответствующее энергии $\frac{3}{2}\hbar\omega$. На самом деле удастся сравнительно легко написать формулы, позволяющие получить полную совокупность решение для гармонического осциллятора. Но до того, как это сделать, понадобится отвлечься на операторную алгебру, установить коммутационные соотношения между операторами p и x .

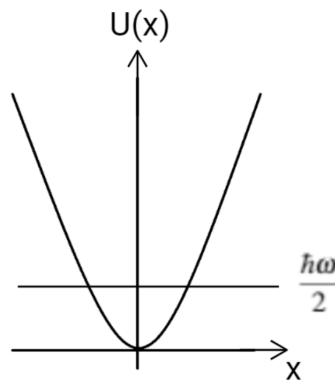


Рис. 6.10. Уровень основного состояния в параболической яме

Операторная алгебра. Коммутаторы

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = -i\hbar\left(x\frac{d}{dx} - \frac{d}{dx}x\right)$$

Если представить, что этот оператор действует на некую функцию, какую-то $f(x)$ справа написать, то понятно, что происходит, оператор $(x\frac{d}{dx} - \frac{d}{dx}x)$ взятия производной, подействует не только на функцию, но и на x , результат действия на функцию будет следующим

$$\left(x\frac{d}{dx} - \frac{d}{dx}x\right)f(x) = xf' - f'x - f = -f(x)$$

Таким образом, поскольку результат действия на произвольную функцию $f(x)$ этой комбинации, это -1 умножить на саму функцию. Заключаем, что этот коммутатор равен минус единица, А коммутатор исходной $[\hat{x}, \hat{p}]$ - это $i\hbar$. $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ Теперь понадобятся два других коммутатора, это коммутаторы $[x^2, p]$ и $[p^2, x]$. Для того чтобы вычислить их, и любые более высокие степени прокоммутировать, уже явно выписывать результат действия на произвольную функцию не надо, можно свести их к известному коммутатору

$$[x^2, p] = xxp - pxx = x(px - [p, x]) - (xp - [p, x])x$$

Два члена xpx одинаковые, значит осталось только то, что имеет отношение к коммутаторам, а коммутатор $[p, x]$ нам известен и простой, коммутатор $[x, p] = i\hbar$, коммутатор $[p, x]$, соответственно $-i\hbar$, значит $x * i\hbar$ остается, и тут то же самое

$$[x^2, p] = xxp - pxx = x(px - [p, x]) - (xp - [p, x])x = 2i\hbar x$$

Второй коммутатор, это все то же самое, только с точностью до минуса

$$[p^2, x] = -2i\hbar x$$

Спектр гармонического осциллятора: продолжение

Вернёмся к нашему гармоническому осциллятору. Утверждаем, что если некая $\Psi_n(x)$ является решением уравнения Шредингера для гармонического осциллятора, то есть, является собственной функцией уравнения Шредингера, соответствующей некой энергии E_n , то есть способ найти и другую функцию, которая тоже будет являться решением уравнения Шредингера, но уже с другой энергией формула

$$\Psi_{n+1} = (i\hat{p} - m\omega\hat{x})\Psi_n$$

Видно, зачем выписывали эти два коммутатора, мы знаем, как левая скобка действует на Ψ_n , она дает просто i_n умножить на Ψ_n . Надо каким-то образом, поменять местами левую и правую скобки, просто прокоммутировать, соответствующее выражение. Сначала скобки напишем в обратном порядке, а потом то, что останется

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega\hat{x}}{2}\right)(i\hat{p} - m\omega\hat{x})\Psi_n = (i\hat{p} - m\omega\hat{x})\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2\right)\Psi_n$$

Коммутатор можно расписать, тут так же, как произведение двух скобок расписываем, четыре члена получается, коммутатор, если расписать, это четыре коммутатора будет, но из них два равны нулю. Коммутатор p и p^2 с очевидностью ноль, вообще, коммутатор любого оператора с собственной степенью, всегда ноль и коммутатор x и x^2 , это тоже ноль. Неважно, сначала x действовать или x^2 , или наоборот. Значит, важны только коммутаторы такие, как *cross*-члены p и x , таким образом

$$(i\hat{p} - m\omega\hat{x})\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2\right) + \left(-i\frac{m\omega^2}{2}[\hat{p}, \hat{x}^2] + \frac{m\omega}{2m}[\hat{x}, \hat{p}^2]\right)\Psi_n$$

Сделаем то, что и собирались сделать, тут гамильтониан, действующий на Ψ_n , это не что иное, как $E_n * \Psi_n$, значит E_n выносим вперед и остается

$$E_n(i\hat{p} - m\omega\hat{x})\Psi_n$$

и вторая строчка, $p x^2$ находим, с точностью до минуса $2i\hbar * x$

$$E_n(i\hat{p} - m\omega\hat{x})\Psi_n + \left(i\frac{m\omega^2}{2}2i\hbar\hat{x} + \frac{\omega}{2}2i\hbar\hat{p}\right)\Psi_n$$

двойки сокращаются, i умножаются друг на друга, скобка дает не что иное, как

$$\hbar\omega (i\hat{p} - m\omega\hat{x})\Psi_n$$

Что такое $(i\hat{p} - m\omega\hat{x})\Psi_n$ написано это Ψ_{n+1} , таким образом, приходим к простому результату, результат действия гамильтониана на Ψ_{n+1}

$$(E_n + \hbar\omega)\Psi_{n+1}$$

$$\Psi_{n+1} = (i\hat{p} - m\omega\hat{x})\Psi_n$$

$$\hat{H}\Psi_n = (E_n + \hbar\omega)\Psi_{n+1}$$

Таким образом, действительно, предъявлен способ — если есть волновая функция Ψ_0 , удовлетворяющая уравнению Шредингера, сделать из нее другую, которая тоже удовлетворяет уравнению Шредингера, но с другой энергией E_{n+1} , которая получилась на $\hbar\omega$ большей. Возвратимся к рисунку. И из нулевого уровня подействовав этим оператором, получаем первый $\frac{3}{2}\hbar\omega$, действуя на это, получаем следующий уровень $\frac{5}{2}\hbar\omega$, и так далее. Общее выражение, равняется

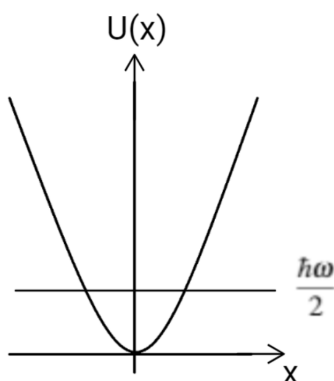


Рис. 6.11. Уровни основного состояния в параболической яме

$$E_n = n + \frac{1}{2}\hbar\omega$$

— это спектр уравнения гармонического осциллятора.

Вывод небрежный — не доказывали, что нет никаких других решений кроме этой последовательности, не доказывали, что еще ряд неприятностей не случится, но это так. Этот вывод приводит к правильному результату. Полученное выражение — это

полная совокупность уровней гармонического осциллятора. Начинаются они от половинки энергии кванта $\hbar\omega$ и идут дальше с интервалом $\hbar\omega$ вверх. Вернемся к тому, с чего начали. Получившийся спектр и эквидистантный уровень находятся на одинаковом расстоянии друг от друга, это есть математическое выражение независимости частоты колебаний от энергии, закаченной в осциллятор. n - это количество фотонов, находящихся в данной моде, и энергия необходимая на то, чтобы добавить еще один фотон, либо уносимая одним фотоном, когда он улетает из гармонического осциллятора. Она всегда одна и та же $\hbar\omega$. Если бы потенциал был не квадратичный и эквидистантности не было, энергия фотонов зависела бы от того, сколько там фотонов, в этом гармоническом осцилляторе есть.

Волновые функции все имеют тоже один и тот же вид. Легко понять, как действуют такие операторы на те функции, с которыми работаем, это всегда будет одна и та же экспонента e в степени минус $m\omega$ делить наш x квадрат, умножить на некий полином. Последовательности этих полиномов хорошо известны в математике, это *полиномы Эрмита*. Оно простое, как и само уравнение. Но важнее всего для нас спектр. Если мы знаем спектр, мы знаем термодинамику. Еще одно важное замечание: в спектр попала только частота, а масса, которая была в исходном гамильтониане, в спектр не вошла. Поэтому, полученную формулу мы успешно можем использовать для анализа свойств мод электромагнитного поля. Мы не знаем, какая там масса колеблется, точнее мы знаем, что никакой физической массы, которая там колеблется нет, но масса неважна, важна только частота, а частоту мы знаем.

Лекция 7. Неразличимость частиц

Движение двух частиц. Бозе

Индийский физик Бозе, предложил описывать систему фотонов, как набор неразличимых частиц и Эйнштейну это понравилось. Поговорим об очень важном понятии — *неразличимости*, которое одно из ключевых понятий в квантовой физике, которое одно из ключевых отличий квантовой физики от физики классической. Кажется, в классике тоже одинаковые частицы придумать несложно, открываем любой задачник по первому курсу по механике, рассмотрим две одинаковых частицы. Тем не менее в квантовой физике, это слово, это понятие наполнено новым смыслом и, фактически поэтому стараются использовать более сильные слова — тождественные частицы, либо неразличимые частицы. Возникновение понятия неразличимости в квантовой физике легко понять, если вспомнить про существование принципа неопределенности. Рассмотрим ситуацию, когда, в какой-то момент времени было две частицы, и они начали двигаться. Какие-то траектории рисуем, вертикальная ось - ось времени. В классической физике, даже если частицы совершенно одинаковые, мы можем всегда проследить за каждой из них, сказать, что вот тут, была частица один, но так, и на выходе тоже частица один, а тут частица два, и на выходе тоже частица два. В квантовом мире у частиц нет определенных координат, всегда есть некая

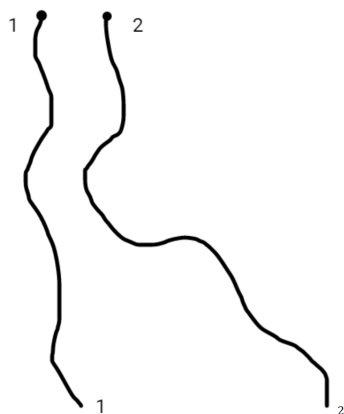


Рис. 7.1. Движение двух частиц

неопределённость. Рисуем два коридора, и видно, что если коридоры эти достаточно широкие, если друг к другу частицы подходили, то не очень понятно, как шли траектории. Из существования неопределенности координаты, становится видно, что в квантовом мире разобраться, какая из двух частиц, если у них все характеристики совпадают, на какое место пришла, не всегда возможно. Отсюда можно сделать

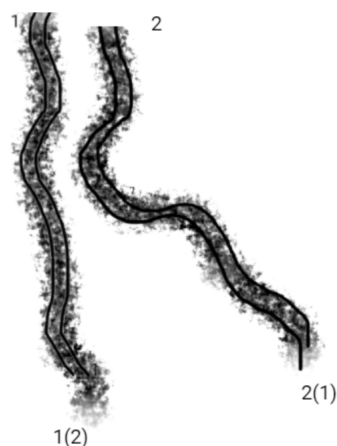


Рис. 7.2. Движение двух частиц в квантовой физике

следующий шаг и прийти к принципу неразличимости частиц, говорящему, что если частицы полностью одинаковые, то в квантовой физике различать их и не следует. То есть, принцип классификации состояний множества одинаковых частиц в квантовой и в классической физике принципиальным образом различаются. Поясним это на простом примере. Нарисуем табличку, возьмем два ящика и будем помещать в эти два ящика по частице. Классика и квантовый случай. Есть две частицы в классике, у них есть номера один и два, нарисую возможные конфигурации: одна частица в ящике один, частица два в ящике два; наоборот в ящике один частица два, в ящике два — частица один; обе частицы в ящике один, ящик два пустой; обе частицы в ящике два, ящик один пустой. Если в квантовом мире различий между двумя ча-

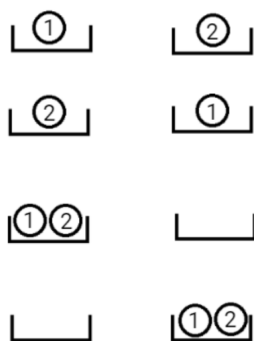


Рис. 7.3. Положение частиц в ящиках в классической физике

стицами нет, мы вынуждены нарисовать три возможных состояния, а не четыре. По одной частице в каждом из двух ящиков; обе частицы в ящике один; обе частицы в ящике два.

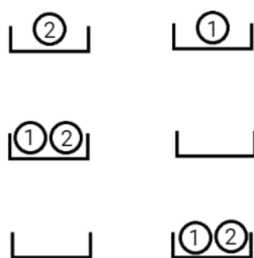


Рис. 7.4. Положение частиц в ящиках в квантовой физике

На комбинаторном уровне, на уровне возможных состояний системы, ситуация с различимыми и неразличимыми частицами разная. Поскольку, уже знаем статистическую физику, и знаем, что статистическая физика, это на самом деле не что иное, как подсчет количества состояний, то сразу ясно, что статистическая физика квантовых частиц должна быть другой, отличающейся от классического случая. Установим свойства простейшей статистической системы с неразличимыми квантовыми частицами. Сразу оговоримся, случай, о котором мы сейчас говорим, это случай бозонов, будут еще фермионы. Случай бозонов — возьмем простейшую систему, состоящую из одного уровня, пусть энергия этого уровня E , связанную, как это положено в статистической физике, с большим термостатом. У термостата есть температура, есть возможность обмениваться частицами с нашим состоянием. Для того чтобы переместить частицу из термостата во вне, нужна тоже некая энергия, принято обозначать буквой μ - *химический потенциал*. Какие состояния есть у этой системы. Число ча-

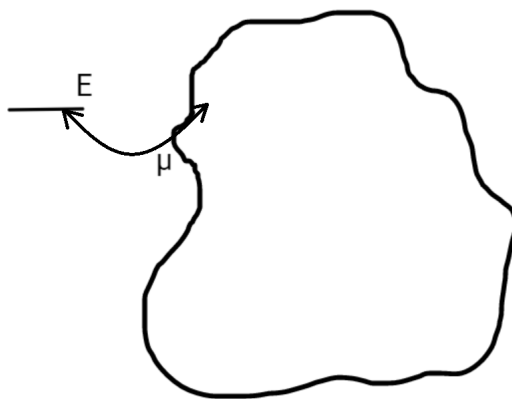


Рис. 7.5. Положение частиц в ящиках в квантовой физике

стиц на нашем уровне равно нулю $N = 0$, $\epsilon_N = 0$. Одна частица $N = 1$, энергия равна $\epsilon_N = E - \mu$ цена которую мы платим за то, чтобы из системы частицу удалить.

$$N = 2$$

$$\varepsilon_N = 2(E - \mu)$$

и так далее. Видно, что пишем фактически те же самые формулы, которые появлялись в прошлый раз, когда говорили про термодинамику гармонического осциллятора.

Статистическая сумма

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{N(E-\mu)}{kT}}$$

геометрическая прогрессия, с точностью до того, что сейчас нет специальной энергии основного состояния. Все то же самое, основное состояние с нулевой энергией

$$\sum_{N=0}^{\infty} e^{-\frac{N(E-\mu)}{kT}} = \frac{1}{1 - e^{-\frac{N(E-\mu)}{kT}}}$$

Вероятность найти в этом состоянии нашу систему, это

$$p_N = \frac{e^{-\frac{N(E-\mu)}{kT}}}{Z}$$

Найдем среднюю энергию

$$\varepsilon = \sum p_N E_N = \frac{1}{2} N E e^{-\frac{N(E-\mu)}{kT}}$$

Вычислим производную

$$-\frac{1}{Z} \frac{d}{d(kT)} Z = \overline{\varepsilon - \mu} = (E - \mu) \frac{1 - e^{-\frac{(E-\mu)}{kT}}}{1 - e^{-\frac{(E-\mu)}{(kT)^2}}} e^{-\frac{(E-\mu)}{(kT)^2}}$$

Делим на Z , поэтому $e^{-\frac{(E-\mu)}{(kT)^2}}$ пишем в числитель без квадрата, и берем производную экспоненты. Один минус от того, что от единицы на x брали производную, другой минус вот он, третий минус вот этот, четвертый минус здесь. Квадрат ушел, и на экспоненту числитель и знаменатель разделим

$$\frac{E - \mu}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1}$$

Посмотрим, что считали, что получилось. Из среднего значения энергии вычитали химический потенциал, это константа, получили $E - \mu$, деленная на знаменатель. Это среднее значение энергии p_N умножить на E_N . E_N - это число частиц на уровне, умножить на энергию. То есть, эта величина пропорциональная числу частиц на уровне. Поэтому то, что тут написано означает

$$\bar{N} = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1}$$

Можно и прямо, и среднее считать, продифференцировать не по единице на kT , а по всей этой формуле, тогда бы только N выскакивала. Если есть уровень, связанный с термостатом, и термостат этот характеризуется температурой T и химическим потенциалом μ , то среднее значение числа частиц на уровне с энергией E , определяется формулой известной, как распределение Бозе-Эйнштейна. Это очень важная формула. Посмотрим предельные случаи. $E - \mu \gg kT$, в экспоненте стоит большая величина, единицей по сравнению с ней можно пренебречь,

$$E - \mu \gg kT \Rightarrow \bar{N} = e^{\frac{-(E-\mu)}{kT}}$$

Вспоминая классическую статистическую физику, узнаем в этой формуле распределение Больцмана. Физика простая, если энергия, отсчитанная от химического потенциала велика по сравнению с kT , это значит, что частиц на нашем уровне мало. Это видно непосредственно из формулы, экспонента минус большая по модулю величина, значит, что на нашем уровне, как правило, частиц нет вообще, иногда бывает одна частица, а две и более редкость. Если, как правило, на уровне одна частица, то все равно речь идет о различных или о неразличимых частицах, различать ничего. Поэтому в пределе малых чисел заполнения, классические и квантовые результаты, как положено совпадают. Противоположный случай рассмотрим. Просто другой знак, что если мы возьмем $E < \mu$, тогда в показателе экспоненты стоит отрицательная величина, экспонента меньше единицы, в знаменателе отрицательная величина, среднее число заполнения отрицательное. Такого не бывает, это противоречие.

Физика Бозе систем устроена таким образом, что химический потенциал всегда меньше минимального значения энергий, которые есть в системе. Если есть несколько уровней, надо найти их уровень с минимальной энергией, химический потенциал точно надо располагать ниже. Это формальное отличие от классического случая, для распределения Больцмана никаких ограничений на химический потенциал нет. Бывает ли химический потенциал равным нулю в точности? Ответ - да, это мы уже знаем. Если вспомним формулу, относящуюся к распределению Планка, буквы μ там нет, для фотонов химический потенциал в точности равен нулю. Так устроены эти частицы, они легко рождаются, также легко умирают, ничего это не стоит с

энергетической точки зрения. А если мы рассмотрим частицы настоящие, частицы, число которых, должно быть неизменно. Это важное рассуждение принадлежит Эйнштейну. Попробуем понять, как химический потенциал меняется в зависимости от температуры в Бозовской системе, где частиц конечное количество. Для определенности будем думать, что в системе есть какие-то уровни, и энергии всех этих уровней превышают ноль. $E - \mu$ всегда должно быть положительным, значит химический потенциал, какой-то отрицательный. Схематично нарисуем систему уровней. Самый

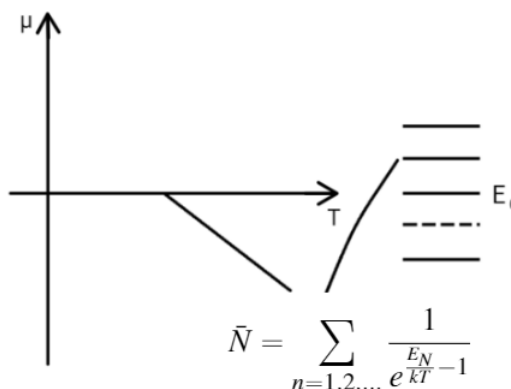


Рис. 7.6. Система уровней

низкий у нуля и у него энергия равна нулю. Начнем с какой-то температуры. Есть некий химический потенциал, есть некое распределение по уровням. Начнем температуру уменьшать. Химический потенциал, как-то изменяется, можно понять, что он идет на увеличение. Максимум до чего он может дорасти, это до нуля. Рассчитаем сколько есть частиц на возбужденных состояниях, это сумма по всем состояниям формула, рисунок. Это то, что мы только что выяснили. Химический потенциал, в крайнем случае, равен нулю. Значит $\bar{N}$ максимальная на возбужденных состояниях, это

$$\bar{N} = \sum_{n=1,2,\dots} \frac{1}{e^{\frac{E_n}{kT}} - 1}$$

чем ниже будем опускать температуру, тем сильнее будет расти это экспонента, и в конце концов, если только первый уровень отличается по энергии хоть на чуть-чуть от нулевого, в конце концов совокупное число частиц на этих верхних уровнях, оказывается экспоненциальным малым. Практически все частицы лежат на основном состоянии, лежат в уровне с энергией равной нулю. Если уровней очень много, если частиц очень много, если перед нами макроскопический кусок квантовой материи, то же самое, это рассуждение показывает, что макроскопическое число частиц порядка N авогадро, все окажутся в состоянии с энергией E_0 . Как это возможно с

точки зрения распределения Бозе-Эйнштейна? Надо потребовать формально, чтоб μ практически в макроскопическом пределе точно равнялась энергии E_0 , тогда в знаменателе будет очень маленькая величина, в макроскопическом пределе ноль и число N_0 , μ стремится к нулю, и N_0 оказывается порядка N_{avg} , $N_0 N_{avg}$.

Конденсация Бозе-Эйнштейна

Совершенно новое явление, по сравнению с классическим случаем, если в системе квантовых неразличимых бозевских частиц температуру устремить к нулю, начиная с некоторого значения температуры, все они оказываются в одном и том же состоянии. Это явление называется - *конденсацией Бозе-Эйнштейна*. Мировой науки еще лет двадцать потребовалось для того, чтобы разобраться, как это все видоизменяется, если между частицами есть взаимодействия. Ключевые фамилии Ландау и Боголюбов. Тем не менее ответ, который был угадан Эйнштейном, он правильный. Есть феномен формирования многочастичного состояния, в котором все частицы ведут себя абсолютно одинаково, потому что все находятся в одном и том же квантовом состоянии. Бозе-Эйнштейновский конденсат, это состояние, которое показывает совершенно необычайные свойства. Оно известно в жидком гелии, жидкий гелий сверхтекучий.

Последние 10-20 лет в большой моде были эксперименты с ультра холодными атомами в оптических ловушках, они тоже показывают Бозе-конденсат. Такое, как принято говорить, макроскопическое квантовое явление, когда ансамбль большого количества и большого числа частиц, начинает вести себя совершенно необычайным образом, потому что, эта частица квантовая. Подробный анализ явления Бозе-конденсация сильно выходит за предел нашего курса, но тот факт, что химический потенциал, может совпадать в макроскопическом пределе с энергией нулевого состояния, и что, соответствует, явлению Бозе-Эйнштейновской конденсации стоит запомнить. Все это для систем, в которых общее число частиц фиксировано, тогда только проходит это рассуждение о том, что если на верхних уровнях частиц нет, то их должно быть много на нижнем. А для фотонов это не так, потому что нет фактически нижнего уровня, нет фотона с $k = 0$.

Поговорили о системе фотонов, как о системе тождественных частиц, ввели важное понятие неразличимости. Ввели статистику Бозе-Эйнштейна. Перейдём к разговору об атомах, разговору об электронах вращающихся вокруг ядра. Это последняя из базовых моделей квантовой физической формы, с которой мы будем иметь дело. Электрон, обращающийся вокруг ядра и с взаимодействующими с ним кулоновскими силами. До того как писать формулы, непосредственно относящиеся к этой задаче,

чуть-чуть поговорим о симметрии. Атом, это система со сферической симметрией. Самая высокая симметрия, которая есть в нашем трёхмерном пространстве.

Как помним, симметрия потенциала, означает важные особенности для спектра энергий и вида волновых функций в системе. На примере четного потенциала видели, что свойства волновых функций наследуют, что-то от симметрии потенциала, в том случае они разделялись на четные и нечетные. То же самое происходит и в случае сферической симметрии. Но симметрия гораздо сложнее. Сложнее и интереснее последствия классификации для волновых функций энергий. Говоря сложнее, имеем в виду вещь, на самом деле, с точки зрения теории групп полностью определенная. Это группа Неабелева, у нее различные элементы, друг с другом не коммутируют. Результатом будет являться то, что в системах со сферической симметрией, состояния окажутся вырожденными. Одному и тому же уровню энергии может соответствовать несколько различных волновых функций. Рассмотрим простейший пример, который будет легко расписать, пример потенциала, обладающего сферической симметрией. Знаем свойства гармонического осциллятора, знаем его спектр. Введем трехмерный гармонический осциллятор, то есть гамильтониан вида

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}r^2$$

где $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$ - векторы в трехмерном пространстве, то есть трехкомпонентные вектора, сразу видно, что, это гамильтониан со сферической симметрией, значит r^2 , а не по отдельности x, y, z входят в потенциал. Перед нами такой потенциал, если взять параболу и завершать, получится некое тело. Есть сферическая симметрия, с другой стороны несложно расписать покомпонентно, для x, y, z

$$\left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}x^2\right) + \left(\frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}y^2\right) + \left(\frac{p_z^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}z^2\right)$$

фактически три независимых друг от друга гармонических осциллятора. Волновую функцию $\Psi(\mathbf{r})$, тогда можно искать в виде произведения трех волновых функций

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_x(x)\Psi_y(y)\Psi_z(z)$$

каждая из которых, является одной из собственных функций одномерного гармонического осциллятора.

$$\left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}x^2\right) + \left(\frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}y^2\right) + \left(\frac{p_z^2}{2m} + \frac{m\Omega^2}{2}z^2\right) = H_x + H_y + H_z$$
$$E_x\Psi_x = H_x\Psi_x$$

$$E_x = \hbar\Omega \left(n_x + \frac{1}{2} \right)$$

Если подействовать H_x , на такую волновую функцию, то он действует только на x компонент, значит Ψ_x он превратит в то, что нам надо, а остальные компоненты он не тронет, выскочит дополнительно энергия. То же самое с y и с z .

$$\begin{aligned} E_y \Psi_y &= H_y \Psi_y \\ E_y &= \hbar\Omega \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \\ E_z \Psi_z &= H_z \Psi_z \\ E_z &= \hbar\Omega \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

Если эту волновую функцию всю подставить в правую часть уравнения Шредингера, то из-за суммы гамильтонианов, выскочит сумма всех этих E_x , E_y , E_z и полная энергия окажется равна $E = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})$. Каждое из чисел n_x , n_y , n_z независимо, может быть, равно нулю, одному, двум и так далее. Видно, что если состояния с минимальной энергией, соответствующие всем n_x , n_y , n_z равно нулю, единственная - $E = \frac{3}{2}$, то следующее состояние $E = \frac{5}{2}$ трехкратно вырождена. Либо n_x равно единице, остальные два - нули, либо n_y равно единице, либо n_z равно единице. Следующая $E = \frac{7}{2}$, вырождена уже шестикратно.

И так далее, каждому E_n соответствует, как анонсировали, несколько состояний с разными волновыми функциями. Видно, что с ростом энергии, кратность вырождения растет. Этот пример, хорош для того, чтобы показать, что, в принципе, возможно вырождение. Но он немножко слишком симметричный гармонический осциллятор, это все-таки специальная модель, и на эти числа сильно смотреть не надо. Это не случай общего положения, это результат вычислений в конкретной модели.

Свойства уравнения Шредингера

Мы будем заниматься свойствами уравнения Шредингера в системе с центральным потенциалом. То есть гамильтониан равен

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + U(r)$$

r - радиус-вектор от начала координат, зависимости от углов сферических нет. Проблема в том, что мы знаем, как выглядят операторы импульса, формула оператор Лапласа, но оператор Лапласа легко пишется в декартовых координатах, это

сумма вторых производных, а надо понять, какое все это имеет отношение к сферической симметрии. Нужен, оператор Лапласа в угловых переменных, в сферических координатах, и при этом, какой-нибудь физический смысл желателен для этого оператора. Начнем с того, что выясним, как оператор Лапласа действует на функции, которые зависят только от радиус-вектора, но не от углов. Известно, что волновая функция не обязательно обладает той же симметрией, что и потенциал, то есть, может в ней зависимость от углов быть. Важный частный случай, это зависимость только от радиус-вектора. Таким образом, надо вычислить, как оператор Лапласа действует на некую функцию, $\Delta R(r)$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

Продифференцируем r , например, по x , когда мы берем производную, возникает множитель $\frac{1}{2}$, а в числителе надо продифференцировать подкоренное выражение по x , получится $2x$, двойки сокращаются.

$$\frac{dr}{dx} = \frac{d}{x}$$

То же для y и z .

$$\frac{dr}{dy} = \frac{d}{y}$$
$$\frac{dr}{dz} = \frac{d}{z}$$

Первая производная по x равняется, таким образом,

$$\frac{dR(r)}{dx} = \frac{x}{r} \frac{dR}{dr}$$

Вторая производная

$$\frac{d^2 R(r)}{dx^2} = \left(\frac{1}{x} - \frac{x^2}{r^2} \right) \frac{dR}{dr} + \frac{x^2}{r^2} \frac{d^2 R}{dr^2}$$

то же самое по y и по z

$$\frac{d^2 R(r)}{dy^2} = \left(\frac{1}{y} - \frac{y^2}{r^2} \right) \frac{dR}{dr} + \frac{y^2}{r^2} \frac{d^2 R}{dr^2}$$

$$\frac{d^2 R(r)}{dz^2} = \left(\frac{1}{z} - \frac{z^2}{r^2} \right) \frac{dR}{dr} + \frac{z^2}{r^2} \frac{d^2 R}{dr^2}$$

Результат действия оператора Лапласа, это сумма этих трех производных. $\Delta R(r)$ равняется - члены при первой производной три раза $\frac{1}{r}$, вычесть x^2 , плюс y^2 , плюс z^2 , это r^2 делим r^3 , опять $\frac{1}{r}$, только со знаком минус и без коэффициентов, таким образом, $\frac{3}{r} - \frac{1}{r}$, остается

$$\Delta R(r) = \frac{2}{r} \frac{dR}{dr}$$

При второй производной x^2 , z^2 , y^2 , r^2 с r^2 сокращаются

$$\Delta R(r) = \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{d^2 R}{dr^2}$$

Компактное выражение. Его часто пишут в таком виде, это тавтологическая запись

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} R(r)$$

Если раскрыть производную видно, что-то же самое. Если оператор Лапласа действует на функцию, зависящую только от радиус-вектора, то мы знаем, как это происходит. Если были тут были еще углы, то были бы еще слагаемые. То, что написали, то, что есть результат действия на координату r , обозначим

$$r = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr}$$

а весь оператор Лапласа разделим на радиальную часть, и то, что осталось называть угловой частью, где φ , Θ - углы

$$\Delta = \Delta_r + \Delta_{\varphi, \Theta}$$

Поищем чему угловая часть оператора Лапласа равняется. Возьмем разность $(\Delta - \Delta_r)$ и подействуем этой разностью, на какую-нибудь функцию, обозначим φ , уже зависящую от трех координат от x, y, z которые подставим в виде сферических координат

$$(\Delta - \Delta_r)\varphi = (r \cos \varphi \sin \Theta r \sin \varphi \sin \Theta r \cos \Theta)$$

Вычислим, как радиальная часть оператора Лапласа, на это действует. Чтобы посчитать первую производную, должны продифференцировать по каждой из переменных

$$\frac{d}{dr}\varphi = \frac{x}{r}\frac{d\varphi}{dx} + \frac{y}{r}\frac{d\varphi}{dy} + \frac{z}{r}\frac{d\varphi}{dz}$$

надо умножить это на r^2 и вычислять следующую производную

$$r^2\frac{d\varphi}{dr} = xr\frac{d\varphi}{dx} + yr\frac{d\varphi}{dy} + zr\frac{d\varphi}{dz}$$

Это одна треть от нужного выражения. r сокращаются, выражение длинное, но с понятной структурой, есть первая производная, а дальше комбинация вторых.

$$\frac{d}{dr}r^2\frac{d\varphi}{dr} = 2x\frac{d\varphi}{dx} + xr\left(\frac{x}{r}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{y}{r}\frac{d^2\varphi}{dx dy} + \frac{z}{r}\frac{d^2\varphi}{dx dz}\right)$$

Дальше будем выписывать то, что относится к y

$$+ 2y\frac{d\varphi}{dy} + xy\frac{d^2\varphi}{dx dy} + y^2\frac{d^2\varphi}{dy^2} + yz\frac{d^2\varphi}{dy dz}$$

и для z

$$+ 2z\frac{d\varphi}{dz} + xz\frac{d^2\varphi}{dx dz} + y^2\frac{d^2\varphi}{dy^2} + z^2\frac{d^2\varphi}{dz^2}$$

Чтобы получить результат действия радиальной части оператора Лапласа, надо это выражение еще разделить на r^2 .

Мало что можно упростить, чуть-чуть подобных можно привести, при смешанных производных стоит 2, сильно короче выражение от этого не становится. Выпишем целиком результат действия угловой части оператора Лапласа

$$(\Delta - \Delta_r)\varphi$$

Δ простое выражение, это сумма квадрата вторых производных, тут вторые производные тоже есть, все это нужно разделить на r^2 , значит три вторых производных будет

$$(\Delta - \Delta_r)\varphi = \frac{d^2\varphi}{dx^2} - \frac{x^2}{r^2}\frac{d^2\varphi}{dx^2}$$

если загнать под общий знаменатель, то получится $x^2 + y^2$ в числителе, так и будем писать, сразу все вторые производные допишем

$$(\Delta - \text{Delta}_r)\varphi = \frac{1}{r^2} \left((y^2 + z^2) \frac{d^2\varphi}{dx^2} + (x^2 + z^2) \frac{d^2\varphi}{dy^2} + (x^2 + y^2) \frac{d^2\varphi}{dz^2} \right.$$

далее с минусом слагаемые идут, минус все смешанные производные, они все с коэффициентом два, потому что два раза встречаются

$$\left. -2xy \frac{d^2\varphi}{dxdy} - 2xz \frac{d^2\varphi}{dxdz} - 2yz \frac{d^2\varphi}{dydz} - zx \frac{d\varphi}{dx} - 2y \frac{d\varphi}{dy} - 2z \frac{d\varphi}{dz} \right)$$

Очень длинная формула, работать с ней невозможно, но ее можно переписать в компактном и в физически прозрачном виде, если обратиться к понятию углового момента. Угловой момент в классической физики. Векторное произведение, то же самое здесь. Вводим понятие углового момента, векторное произведение операторов координаты импульса, за одним исключением, сейчас увидим каким

$$\vec{l} = i\hbar \frac{d}{dr}$$

Написали векторное произведение операторов координаты импульса, опустив постоянную Планка. Дело в том, что оператор момента имеет размерность постоянной Планка, поэтому в квантовой теории очень удобно работать именно с вот таким безразмерным оператором углового момента. По каждому компоненту его распишем

$$\begin{aligned} \ell_x &= -i \left(y \frac{d}{dz} - z \frac{d}{dy} \right) \\ \ell_y &= -i \left(z \frac{d}{dx} - x \frac{d}{dz} \right) \\ \ell_z &= -i \left(x \frac{d}{dy} - y \frac{d}{dx} \right) \end{aligned}$$

Если мы собираемся заниматься задачей об обращении электрона вокруг ядра, то что появился на свет оператор момента, никакого удивления вызывать не должно. Но на уровне гамильтониана, так в первой степени оператор момента появиться не может, это вектор, точнее псевдовектор, а оператор гамильтониана, это скаляр. Поэтому запишем квадрат оператора момента, это будет скалярная величина

$$\vec{l}^2 = \vec{l}_x^2 + \vec{l}_y^2 + \vec{l}_z^2$$

$i^2 = -1$, далее покомпонентно вычисляем. Хочется пронести z вперед, чтоб вторую производную вычислять, уже достаточно поработали с коммутаторами, чтоб понять, что

$$-\left(y^2 \frac{d^2}{dz^2} + z^2 \frac{d^2}{dy^2} - y \frac{d}{dz} z \frac{d}{dy} - z \frac{d}{dy} y \frac{d}{dz}\right)$$

если производную от самого z взять.

Таким образом

$$\begin{aligned}\frac{d}{dz} z \frac{d}{dy} &= yz \frac{d^2}{dydz} + y \frac{d}{dy} \\ z \frac{d}{dy} y \frac{d}{dz} &= yz \frac{d^2}{dydz} + z \frac{d}{dz}\end{aligned}$$

ℓ_y^2 :

$$-\left(y^2 \frac{d^2}{dz^2} + z^2 \frac{d^2}{dy^2} - 2yz \frac{d^2}{dydz} - y \frac{d}{dy} - z \frac{d}{dz}\right)$$

ℓ_z^2 :

$$-\left(z^2 \frac{d^2}{dx^2} + x^2 \frac{d^2}{dz^2} - 2xz \frac{d^2}{dxdz} - z \frac{d}{dz} - x \frac{d}{dx}\right)$$

ℓ_x^2 :

$$-\left(x^2 \frac{d^2}{dy^2} + y^2 \frac{d^2}{dx^2} - 2xy \frac{d^2}{dxdy} - x \frac{d}{dx} - y \frac{d}{dy}\right)$$

Действительно, первые производные умножить на соответствующие компоненты, каждый из них встречаются по два раза. Перекрестные производные, содержат при себе соответствующие координаты, те же вверху, что и внизу, каждая встречается по два раза.

Вторые производные по каждой из координат, содержат перед собой множитель, состоящий из суммы квадратов двух других координат, тут то же самое. Таким образом, угловая часть оператора Лапласа равняется

$$\Delta(\varphi, \Theta) = \frac{1}{r^2} \bar{\ell}^2$$

И уравнение Шредингера в угловых переменных приобретает простой вид, где есть радиальная часть оператора Лапласа, угловая часть оператора Лапласа и потенциал $U(r)$, который был с самого начала

$$\bar{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\bar{\ell}^2}{r^2} + U(r)$$

Явно хорошая для работы со сферически-симметричными задачами форма, компактная и физически ясная. Самым важным для нас будет присутствие здесь оператора углового момента. Это фактически единственное, что действует на углы, все остальное содержит только букву r , поэтому следующий раз мы начнём с того, что изучим свойства квадрата оператора углового момента.

Лекция 8. Спектры атомов и молекул

Водородоподобные системы

Ранее рассматривали спектр для движения в центральном кулоновском поле. Напишем уравнение Шредингера:

$$E\Phi = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \Phi - \frac{e^2 z}{r} \Phi$$

где первое слагаемое – радиальная часть оператора Лапласа, а второе – центростремительный потенциал.

И запишем уровни энергии, где E_n зависит только от главного квантового числа:

$$E_n = \frac{1}{2n^2} z^2 \frac{me^4}{\hbar^2}$$

Появление заряда ядра в этой формуле очевидно без решения уравнения. Он входит только в последнее слагаемое, описывающее уравнение Шредингера, – потенциал. Значит, с каждой второй степенью e должна присутствовать первая степень z . Таким образом, если спрашивается, как отличаются спектры энергии иона He^+ , у которого один электрон, от уровня энергии атома водорода, то ответ, сразу, в 4 раза больше вся энергия у гелия, так как z^2 . Ядро в два раза тяжелее.

$$n = n_r + l + 1$$

Соответственно, квантовые числа: $n_r, l, m = -l \dots l$.

Спектр атома водорода

Посмотрим на науку о том, как устроены атомы. Написанные формулы непосредственно применимы к атому водорода и водородоподобным системам. Водородоподобные системы – это любые квантовые системы, в которых между двумя частицами с известными массами действуют силы кулоновского притяжения. Сразу можно заметить разницу между пояснением и формулой. Решали задачу о движении одной частицы, а речь идет о системе из двух связанных частиц.

Ответ известен из обычной классической механики. В квантовом случае ничего не меняется. Это задача о движении двух тел или атомов или движении одного тела

с приведенной массой в центральном поле. Если вычесть из общего движения центра масс поступательное, то останется движение приведенной массы в центральном поле:

$$m^* = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Если говорить конкретно об атоме водорода, то масса электрона и протона различаются в 2000 раз. Если m_2 много больше, чем m_1 , видно, фактически, что остается только m_2 . Значит, с высокой точностью, речь идет об атоме водорода, об электроне, который в центральном поле вращается вокруг неподвижного центра. На самом деле, спектроскописты замечают по спектрам $\frac{1}{2000}$ в положении линии.

Какие еще водородоподобные системы можно вспомнить? Одна из них – ион He^+ . Более экзотические вещи, например, позитроний – связанное состояние электрона и позитрона. Это частица и античастица, позитрон ничем от электрона не отличается, кроме заряда. Соответственно, приведенная масса при $m_1 = m_2$ окажется равной $\frac{1}{2}m_e$. У позитрона наоборот: все уровни в 2 раза меньше по энергии. Также известно, что позитроний – нестабильная система. Электрон и позитрон могут аннигилировать, испустив гамма-кванты. Поэтому, в отличие от атома водорода, система заведомо с конечным временем жизни. Само это время жизни зависит от того, как сориентируем спины электрона и позитрона. По величине она будет небольшой.

В твердотельных системах же, например, в полупроводниках носители заряда могут быть двух типов: электроны и дырки. Ведут они себя как частицы с некими эффективными массами и зарядом, соответственно, положительным и отрицательным. Они друг к другу притягиваются и имеют право образовать связанное водородоподобное состояние, которое называется экситон. Такое состояние имеет конечное время жизни, так как электрон-дырка могут аннигилировать, выпустив фотоны видимого диапазона.

Поэтому водородоподобных систем в мире много. Во Вселенной самый распространенный атом – водород. Рассмотрим как устроен спектр атома водорода. По горизонтальной оси расположена величина орбитального момента, по вертикальной – энергия. Чтобы подчеркнуть, что речь идет о связанном состоянии, то есть энергия состояния отрицательная, поэтому будет отсчитывать энергию от вакуума.

Самое низкое состояние – состояние основное. Такое состояние называется $1S$ при $l = 0$. Дальше располагаются состояния с главным квантовым числом равным 2 – это S и p . Далее с числом 3 – S , p , d и т.д.

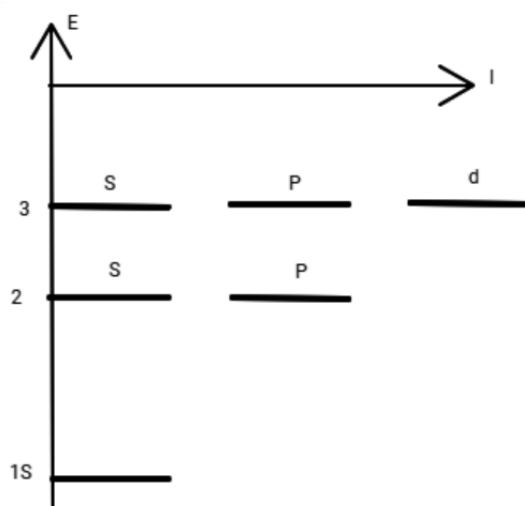


Рис. 8.1. Спектр атома водорода

Излучение при переходе атома из одного состояния в другое. Серия Лаймана, серия Бальмера.

В соответствии с моделью Бора, которая в данном случае совершенно правильно все сообщает, атом может переходить между различными уровнями, испуская и поглощая фотоны, кванты электромагнитного поля. При этом энергия фотона определяется разницей между соответствующими уровнями.

$$\hbar\omega = \left(\frac{1}{n_1} - \frac{1}{n_2}\right) \frac{me^4}{2\hbar^2}$$

Переходы происходят не между произвольными двумя состояниями, а в том случае, когда величина орбитального момента отличается на 1. То есть возможен переход из $2p$ в $1s$ и из $3p$ в $1s$ и т.д.

Можно заметить, что нарисованные переходы образуют серии. Переход в $1s$ называется серией Лаймана, то есть все переходы в конечное, основное состояние атома.

$$np \rightarrow 1s$$

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

$$n = 2, 3, 4, \dots$$

Переходы в состояния с главным квантовым числом 2 – это серия Бальмера.

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

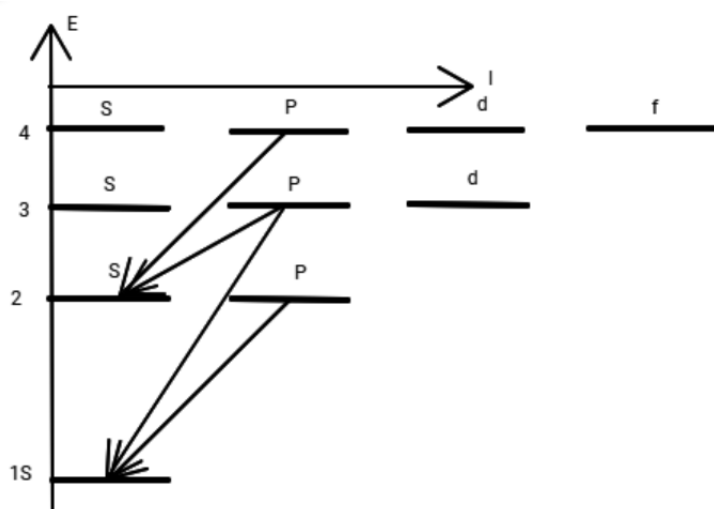


Рис. 8.2. Переход уровней

$$n = 3, 4, \dots$$

Дальше идут следующие серии, но для рассмотрения достаточно первых двух. Известно, что серия Бальмера была открыта в 19 веке, а серия Лаймана в 1914 году. Возникает вопрос: почему? Это объясняется тем, что серия Лаймана находится в ультрафиолетовой (УФ) области. А значит соответствующая экспериментальная техника появилась только в начале 20 века. Для серии Бальмера первые четыре серии заметны в видимом диапазоне, а дальше в инфракрасной (ИК) области. Остальные серии открыты позже, так как лежат все в ИК.

Устройство атомов, отличных от атома водорода

Поговорим об устройстве атомов, отличных от атома водорода, которые содержат больше, чем один электрон. Нужно оговориться, что задача о свойствах первых из них, атома гелия, задача сложная, чем задача о свойствах атома водорода. Это связано с тем, что электроны друг на друга влияют. Часто используется такая упрощенная картинка, говорящая о том, что электрон движется в усредненном поле, созданном ядром и остальными электронами. Эта картинка сильно не строгая. На самом деле, все электроны движутся коррелировано и для того, чтобы узнать свойства атома, нужно решать многочисленные уравнения Шредингера. С математической точки зрения достаточно затруднительно. Тем не менее, если их решить, то получатся некие волновые функции и уровни энергии, описывающие состояния атома в целом. Такие состояния в атомной физике принято называть термами. Оно чаще используется при замене понятий связанных с многоэлектронным движением по орбитам.

Для упрощения, картинка движущихся по отдельности электронов, находящихся на уровнях, определяемых квантовыми числами для движения в центральном поле, – это совершенно нормальное качественное изображение. Поэтому можно думать, что каждый электрон находится на определенном уровне. Тогда в атоме гелия есть два электрона, которые оба находятся на уровне $1S$. Это связано с тем, что взаимодействие с электронами важно и скоррелированность относительно движения электронов. Свойства такого состояния с двумя электронами не сводятся к свойствам двух, движущихся по отдельности, электронов. Качественно оба электрона в гелии в состоянии $1S$ совпадают.

Далее еще сложнее. Следующий атом – литий. Атомный номер у него равен 3. Третий электрон попадает уже не в $1S$, а в $2p$ состояние. Причиной будет свойство электронов, которое принято называть спином.

Спин электрона. Эксперимент Штерна-Герлаха

Отвлечемся от атомной физики и рассмотрим понятие «спин». Это совершенно новое понятие. Обнаружен он был явным образом в 20х годах в экспериментах Штерна и Герлаха. В них исследовались, как атомы серебра пролетают через неоднородное пространство в магнитном поле.

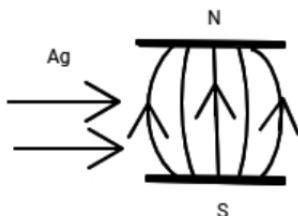


Рис. 8.3. Эксперимент с серебром

Линии между полюсами – силовые линии. Они кривые, так как поле неоднородное. Возникает вопрос: что можно ожидать от мысленного исхода такого эксперимента? Знаем, что у атомов и электронов в них есть орбитальный момент l . В механике, если есть орбитальный момент у заряженной частицы, то это означает, что есть магнитный момент. Если орбитальный момент не равен 0, то возникает соответствующий магнитный момент.

Пусть есть ось, которая выделена направлением магнитного поля. В данном случае приобретает смысл понятие проекции именно на ось Z орбитно-магнитного и вместе с ним орбитального моментов. Энергия в магнитном поле уже будет зависеть от величины проекции, если магнитный момент сонаправлен линии магнитного поля

и противоположен линии магнитного поля энергии системы. Есть разная зависимость энергии от величины проекции, поэтому по-разному движется такой атом с моментом в магнитном поле. Если же магнитное поле сделать неоднородным в пространстве, то в классике результат получим такой же. В зависимости от величины проекции магнитного момента на направление магнитного поля по-разному будут отклоняться соответствующие пролетающие атомы с разным магнитным моментом.

В классической физике квантования нет. На экране должна наблюдаться какая-то однородная картина – размытое распределение. В квантовой физике, если договорились, что квантуется проекция на заданную ось, в соответствии с количеством возможных проекций должно наблюдаться несколько острых пиков. В эксперименте с серебром у Штерна и Герлаха наблюдалось два пика:



Рис. 8.4. Наблюдаемые два пика

С одной стороны хорошо, что есть квантование, но с другой – хорошо, что пиков получилось два. Это вызывает определенное удивление. Действительно, количество возможных проекций магнитного момента на заданную ось, если связывать его с орбитальным моментом, это $2l + 1$ если $l = 0$, то получим 1, если $l = 1$, то 3. Поэтому значение 2 получить нельзя. Более того, если задаваться вопросом, чему равен совокупный орбитальный момент атома серебра, то ответ будет ноль. Казалось, что должна была быть одна полоска или две.

Выясняется, что у электрона есть собственный момент количества движения и связанный с ним собственный магнитный момент. Собственный момент количества движения кратен $\hbar$, если мерить также, как орбитальный, в единицах постоянной Планка.

У электрона он обозначается:

$$s = \frac{1}{2}$$

Нужно подчеркнуть условность того объяснения, которое введено выше. Наличие собственного момента не означает, что электрон как-то вращается. Во-первых, это вращение невозможно ни ускорить, ни замедлить, так как спин электрона всегда равен $\frac{1}{2}$. Во-вторых, электрон – точечная частица. У него нет собственного размера, а значит нет момента инерции, то есть нельзя его закрутить. Спин – это внутренняя характеристика, которая есть у частицы. Также можно думать, что волновая функция электрона

$$\Psi(r, s)$$

зависит не только от координаты, но и от спиновой переменной. И такая переменная действует в пространстве с размерностью 2. Это число возможных проекций с $s_{\text{полная}} = \frac{1}{2}$, а значит

$$s_z = \pm \frac{1}{2}$$

В итоге получаем, спин – внутренняя характеристика частицы. Для электрона она равна $\frac{1}{2}$ в единицах постоянной Планка. Поменять его невозможно. Спин тогда будет являться просто свойством электрона. Формально получаем:

$$m = \frac{1}{2} * 2 + 1 = 2$$

То есть получили две возможные проекции.

Наличие спина видно в спектре, например, атома водорода. Собственный момент количества движения электрона означает наличие собственного магнитного момента. Этот магнитный момент взаимодействует с магнитным моментом, связанным с орбитальным движением. Поэтому линии, которые соответствуют переходам на уровни с $l \neq 0$, окажутся расщеплены. Соответствующие энергетические уровни окажутся расщеплены из-за спин-орбитального взаимодействия. Такое взаимодействие слабое. Известно, что все магнитные эффекты вообще слабы по природе. Слабость связана с тем, что постоянное значение скорости света окажется в знаменателе. Безразмерная скорость света – постоянная тонкой структуры, которая входит в формулу, как квадрат величины. Значит, α^2 – мера малости эффектов. Расщепление линии, связанное со спин-орбитальным взаимодействием, то, что называется тонкой структурой спектров.

Существует сверхтонкая структура, связанная с взаимодействием магнитного момента электрона с движением магнитного момента ядра.

В природе существует только два типа объектов: объекты с целым спином и с полуцелым спином. К первому типу относят фотон, а ко второму – электрон.

Фермион и бозоны. Принцип Паули. Заполнение электронных оболочек

Если спин частицы целый, то такие частицы назовем бозонами. Их в одном и том же состоянии, как на примере фотонов, может быть сколько угодно. Когда расписывали и рассматривали статистику Бозе-Эйнштейна, появлялось состояние, в которых макроскопически много частиц находятся в одном состоянии. Фермионы – частицы с полуцелым спином. В одном квантовом состоянии может находиться только один фермион. Это утверждение носит название принципа Паули. В соответствии с общей номенклатурой принцип – это утверждение, которое ни из чего не следует. То есть оно не связано ни с какими другими уравнениями. Принцип Паули можно сформулировать по-другому, через перестановочную симметрию. В любом случае – это принцип данный извне.

Таким образом, принцип Паули: в одном и том же квантовом состоянии может находиться не более одного фермион заданного типа.

Вернемся к атомам. $1S$ состояние в спектре атома водорода невырождено. Туда может поместиться только два электрона: один с проекцией спина $+\frac{1}{2}$, другой с $-\frac{1}{2}$. Больше нельзя. Поэтому третьему электрону в атоме лития достается следующее состояние – $2S$. В p -состояние «влезает» больше электронов, так как $l = 1$. Таким образом, кратность вырождения соответствующих уровней равна 3. Значит, получится 6 состояний входят в p -оболочку. Если же посмотреть на вторую строку Периодической таблицы Д.И. Менделеева, то сначала заполнятся для элементов $2S$ состояния, потом $2p$. Становится ясна природа Периодической таблицы Д.И. Менделеева, периодического состояния и чередования химических свойств атомов.

Химические свойства элементов определяются наименее хорошо связанными электронами. Если взять атом, у которого электронов много, то отрыва от атома тех, которые находятся на низколежащих уровнях, требуются большие по химическим меркам энергии. Энергия, с которой оперирует химия – электрон-вольты. В химические процессы такие электроны не вступают. Легче всего оторвать только со внешней оболочки. Что касается их: сначала заполняется $1S$, потом $2S$, $2p$, далее $3S$ и т.д. Таким образом, каждая строка Периодической таблицы Д.И. Менделеева начинается с щелочного атома, у которого на внешней оболочке есть один электрон. Он и определяет химические свойства элемента. А остальные электроны не имеют к химии практически никакого отношения. Именно поэтому все элементы из первой группы Периодической таблицы Д.И. Менделеева друг на друга по химическим свойствам похожи.

Спектр атомов щелочных металлов

Для того, чтобы конкретизировать, как происходит заполнение электронных оболочек по мере роста номера атома в Периодической таблице Д.И. Менделеева, рассмотрим спектры щелочных металлов. Воспользуемся представлением о том, что внешний s-электрон движется в эффективном поле, которое создано ядром и остальными электронами. Внешний электрон связан слабее, а значит меньше энергия. Задачу про использование принципа неопределенности можем представить сразу. Если у него энергия меньше, значит пространственный размер соответствующей орбиты больше. Таким образом, речь идет о ситуации, когда есть положительно заряженное ядро, вокруг находится плотное облако электронов на внутренних орбиталях. На расстояниях больше облака летает внешний электрон.



Рис. 8.5. Атом и электрон

Запишем для такой системы уравнение Шредингера:

$$E\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \Psi - \frac{e^2}{r}$$

В самом простом приближении последнее слагаемое – просто потенциал ядра заэкранированный $n-1$ электроном. Атом в целом нейтрален. Поэтому полный заряд ядра в облаке – один элементарный заряд.

Учтем тот факт, что в системе не в точности работает кулоновский потенциал. В уравнении фигурирует какой-то потенциал, отличающийся от кулоновского. Если электрон далеко от атома, то потенциал будет более похож на кулоновский. В нашей ситуации можно предположить, что потенциал – первый член разложения ряда Лорана кулоновского по степеням $\frac{1}{r}$. Можно записать следующую поправку центробежному потенциалу:

$$E\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \Psi - \left(\frac{e^2}{r} + \frac{v_2}{r^2} \right) \Psi$$

То есть в уравнение добавили некую поправку ко второму слагаемому, то есть к величине l .

$$(l + \delta l)(l + \delta l + 1) = l(l + 1) - \frac{2m}{\hbar^2} v_2$$

В нулевом порядке малости имеем тождество:

$$l + \delta l + 1 = l + 1$$

Запишем первый порядок по δl :

$$(2l + 1)\delta l = -\frac{2m}{\hbar^2} v_2$$

Таким образом можно написать спектр. Вспоминаем, что

$$n = n_r + l + 1$$

Получаем

$$E_n = \frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{\left(n - \frac{2mv_2}{\hbar^2} \frac{1}{2l+1}\right)^2}$$

Величину v_2 не знает. Замечаем, что E не перестало зависеть от n и также теперь зависит от l . Это простейшая демонстрация того факта, что E зависит только от суммы $n + l$ – это случайное вырождение. Это специфика именно кулоновского потенциала. Наш же потенциал перестал быть в точности кулоновским и поэтому сразу появилась зависимость поотдельности от n и l .

С точки зрения картинки спектра и утверждения о потенциале означает, что энергии $2S$ и $2p$ уровней не совпадают. Ранее они были выстроены в строку для водорода. Если же говорить о литии, натрии и т.д. диаграмма становится интереснее:

На самом деле поправка не является малой. Например, для лития энергия связи $2S$ состояния это, примерно, 5,4 эВ, а для $2p$ – 3,5 эВ. Раз эти состояния по энергии не совпадают, значит фотоны могут излучаться и при переходе с $2p$ на $2S$. На $1S$ все занято и эти электроны отдавать очень тяжело. А электрон из $2p$ в $2S$ термически возможно перекинуть. В итоге получим линию, примерно, 600 нм, которая видна в разогретых парах стали лития или если порошок лития посыпать на огонь. Литий, как известно, окрашивает пламя в розовато-красный цвет, что является характерный цветом красного спектра. Что касается натрия, переход происходит $3p$ в $3S$. Все происходит тоже самое, но энергия перехода больше. Натрий окрашивает пламя в ярко желтый цвет, что является характерный цветом желтого спектра. То есть есть

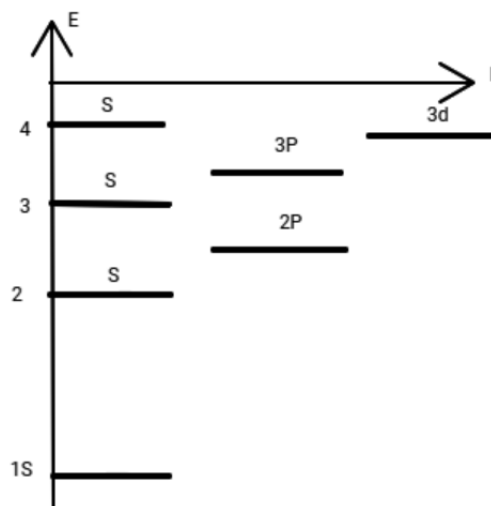


Рис. 8.6. Диаграмма щелочных металлов

переход из p в s уровни. Такой переход осуществляется для всех щелочным металлов, они яркие и оптически видны.

Получили первое свойство: снимается случайно вырождение, если потенциал стал не кулоновский и возможен переход между s и p состояниями.

Если посмотреть, что происходит дальше в атоме, то выясняется, что $4s$ уровень находится ниже, чем $3d$. Поэтому сначала до того, как полностью заполнилась $3d$ оболочка, начинает заполняться оболочка $4s$. Что является причиной существования в Периодической таблице Д.И. Менделеева побочных групп. Это такие атомы с частично незаполненными внутренними оболочками. Это атомы, у которых химическая валентность может меняться в широких пределах, потому что химические процессы затрагивают не только $4s$ электрон, но и с $3d$ оболочки тоже. К таким элементам относят хром (Cr), никель (Ni), железо (Fe), кобальт (Co) и т.д. У них первая полностью заполненная $3d$ оболочка.

Тем самым увидели, что есть из-за электрон-электронного взаимодействия, из-за отличия потенциала атомного остова от кулоновского сдвиги в уровнях. Это является причиной возникновения частично заполненных оболочек. Таким образом, атомы в Периодической таблице Д.И. Менделеева идут в порядке увеличения общего количества электронов. Но это не соответствует заполнению оболочек, как они идут в спектре атома водорода по мере увеличения главного квантового числа.

Атомы побочных групп. Правило Маделунга-Клечковского

Есть эмпирическое правило – правило Маделунга. В отечественной литературе называется правилом Клечковского. Оно гласит, что нужно смотреть на число $n + l$, то есть заполнение происходит по мере роста этого числа. Если $n + l$ совпадают, то у кого значение n меньше, те заполняются первыми. Это правило выполняется почти всегда, но есть и исключения.

Рентгеновские термы (внутреннее строение атомов)

Химия элемента – внешние оболочки частично заполненные. Возникает вопрос: можно ли исследовать то, что делается на внутренних оболочках? Да, можно. Вспомним опыты Мозля. Когда электроны выбивались летящей частицей, которая несет большую энергию, например, разогнанным электроном. Соответственно, если бомбардировать чем-то разогнанных до высоких энергий атомы и выбивать из него электроны, то можно посмотреть, как устроен атом внутри, как устроена энергетика внутренних оболочек. Есть общее название – рентгеновские термы (высокие по энергии по сравнению с оптическими). Термы – многоэлектронные конфигурации. Соответствующие электроны выбиваются, а потом атом релаксирует с испусканием квантов рентгеновского диапазона. Бывают и более сложные процессы. Например, безызлучательные. Один электрон падает вниз, а другой уносит потерянную энергию из атома. Этим занимается отдельная область физики.

Механизмы связи молекул. Ионная связь. Ковалентная связь

Рассмотрим, как атомы переходят и объединяются в молекулы и чем возбуждение в системах молекул в молекулярных системах принципиально отличаются от спектра водорода.

Первый вопрос: почему вообще два атома притягиваются друг к другу? Различают несколько механизмов связи. Рассмотрим два наиболее базовых – ионная и ковалентные связи.

Ионная связь – это связь, которая объединяет два сильно различных атома, например, натрий и хлор. Молекула хлорида натрия существует в парах, как известно. Из курса химии известно в чем дело. Электрон переходит практически полностью с атома натрия на атом хлора. Естественно, внешний электрон в атоме натрия слабо связан с ядром, но все же связан. Для того, чтобы оторвать, увести на бесконечность этот электрон потребуется некая энергия, которую принято называть энергией связи $E_{\text{св}}$.



Рис. 8.7. Натрий

Оказывается, если к нейтральному атому из бесконечности электрон принести, то этот процесс энергетически выгоден. Приобретается энергия, которая называется энергия сродства к электрону $E_{\text{сродства}}$.



Рис. 8.8. Хлор

Понять можно процесс, если посмотреть на атом. Около него некое облако, он нейтрален и поместив на некотором расстоянии от него электрон.



Рис. 8.9. Взаимодействие электрона и атома

Потенциал, в котором движется электронное облако, это теперь не только потенциал ядра, а потенциал с поправкой, которая вызвана действием электрона. Электронам в облаке энергетически выгодно уйти от внешнего. Происходит отталкивание одноименных зарядов. В среднем волновая функция меняется таким образом, что возникает поляризация. В среднем ядро оказывается к внешнему электрону ближе, чем электроны оболочки атомов. Таким образом, электрон притягивается к атому. Если рисовать потенциал зависимости от расстояния, то получим

Значит, ближе к атому – это простая картинка с поляризацией конечно перестанет работать, но наличие минимума, некой энергии связи, не вызывает сомнений.

Также показано, что два куска металла одинаково заряженных в вакууме могут притягиваться друг к другу. Нейтральный кусок металла за счет именно поляриза-

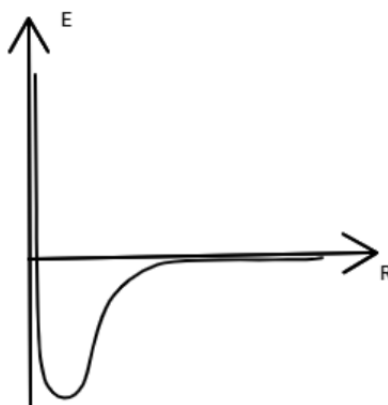


Рис. 8.10. Зависимость потенциала от расстояния

ции к заряженному притягивается. Теперь ясно, что если маленький заряд на этот кусок металла посадить, то все равно притяжение превысит отталкивание одноименных зарядов. Важно, чтобы куски металла были конечного размера. Два точечных заряда всегда отталкиваются. А два объекта конечного размера, за счет поляризации, начинают притягиваться.

Таким образом, возвращаясь к системе хлорида натрия, если энергия сродства электрона атома элора на много больше энергии связи электрона в атоме натрия, то электрону конечно выгодно перескочить с натрия на хлор. И даже есть это не так, то определенные выгоды есть, то после того, как электрон перешел на другой атом натрия становится катионом (положительно заряжен), а хлор – анионом (отрицательно заряжен). Это дает дополнительный выйгрыш в энергии.

Таким образом, ионная связь – механизм связи, который возникает между атомами с противоположных сторон Периодической таблицы Д.И. Менделеева, между существенно различными атомами. Суть состоит в том, что электрон почти полностью переходит с одного атома на другой.

Ковалентная связь – это связь между близкими по химическим свойствам или просто одинаковыми атомами. Например, это связь, которая удерживает вместе атомы в молекулах кислорода (O_2) или азота (N_2).

Попробуем понять на простом уровне, что может такие одинаковые объекты друг к другу притягивать. Для этого рассмотрим простую задачу о частице, находящейся в двух ямах-потенциалах.

Если увести две ямы друг от друга очень далеко и пустить в эту систему частицу, то будет картина, когда частица находится или в одной яме, или в другой. Получим два уровня, характеризующиеся энергией связи. Если ямы одинаковые, то и уровни

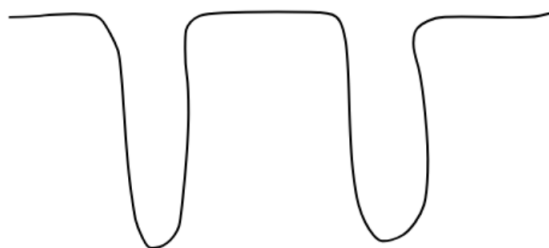


Рис. 8.11. Задача о частице

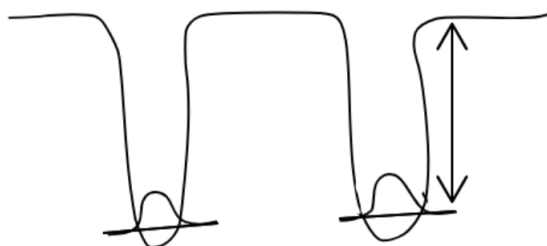


Рис. 8.12. Уровни энергий в ямах

одинаковы.

Будем сдвигать ямы, приближая друг к другу. В конце концов за счет туннельного эффекта станет существенно то, что частица сможет переходить из одной ямы в другую. Надо будет решать задачу о двух ямах, разделенных туннельным барьером. Вырожденный уровень заданный энергией связи расщепится на два. Волновая функция при этом может быть симметричная или антисимметричная.

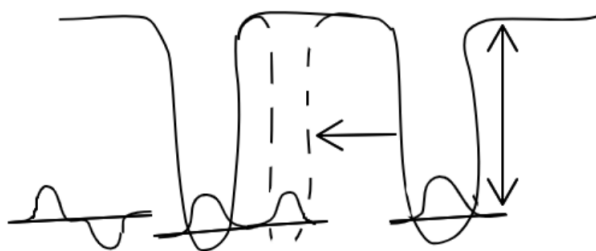


Рис. 8.13. Волновые функции при приближении ям

Таким образом, если находимся в системе с антисимметричной волновой функцией по сравнению с удаленными друг от друга ямами, то энергия системы повышается. Если же симметричная, то понижается. Если предположить, что система находится в основном состоянии, значит энергия понижена. Чем ближе ямы друг к другу приближаем, тем сильнее туннельные перекрытия, тем меньше энергия такого общего состояния. Если энергия уменьшается с приближением, то между ними жействует

некая сила притяжения. Что является просто производной энергии по расстоянию.

В итоге получили качественно правильный вывод. Если разрешить электронам между двух атомов обмениваться и волновые функции относить не к одному атому, а к двум атомам сразу, то энергия системы понижается. Это мезанизм, который ответственный за возникновение ковалентной связи. Ковалентная связь сильная. Молекулы кислорода или азота разорвать очень тяжело.

Молекулярные спектры. Колебательный спектр

Рассмотрим молекулярные спектры. Естественно, если атомы объединены в молекулу, то ничего не мешает электронам переходить с уровня на уровень. Линии излучения соответствующие электронным переходам в молекулах присутствуют также, как и в атомах. Они не видны по сравнению со случаем отдельных атомов, но их природу знаем. Существует и возбуждение, связанное непосредственно с тем фактом, что два атома или больше объединены в молекулу.

Нарисуем кривую для энергии связи двух атомов, как функцию расстояния между ними:

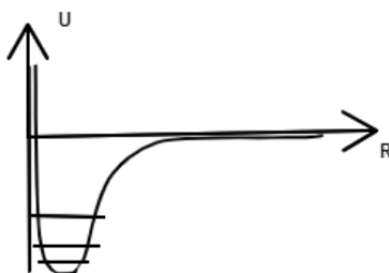


Рис. 8.14. Кривая энергии для атомов

Рассматриваем задачу, если речь идет о двух атомах в молекуле, о спектре связанных состояний системы с заданным потенциалом. У такой системы есть основное состояние, которое находится в минимуме, вблизи него совершают нулевые колебания системы. Дальше идут другие уровни. Эти уровни связаны с относительным движением, колебаниями ядер.

Исследуем свойства таких колебаний. Для простоты аппроксимируем потенциал первыми двумя членами ряда Тейлора.

$$E\Psi = \frac{\hat{p}^2}{2M}\Psi + U_{\max}\Psi + \frac{U^{(2)}}{2}(R - R_{\min})^2\Psi$$

Написанная система – просто одномерный гармонический осциллятор. Можно записать спектр:

$$E_n = U_{\max} + (n + \frac{1}{2})\hbar\Omega$$
$$\Omega = \sqrt{\frac{U^{(2)}}{M}}$$

Важно оценить величину $\hbar\Omega$. Посмотрим на кривую $U(R)$. У этой кривой все масштабы определяются атомными единицами. Расстояние до минимума – несколько размеров атома. То есть с точностью до константы – атомные единицы длины с точностью до численного фактора (5-10 радиусов Бора). Глубина с точностью до численных факторов атомный масштаб энергии. Для того, чтобы построить эту кривую, нужно зафиксировать положение одного и другого ядра и посмотреть, какая получается энергия системы. Раз зафиксировали положения ядер, значит движение их отсутствует. Поэтому масса ядра не входит в энергию, а только заряд. Фундаментальной малости отношения массы электрона к массе ядра нет и скорость света тоже не может входить, так как задача не является релятивистской.

Для энергии обязательно с каким-нибудь численным фактором получится комбинация $\frac{me^4}{2\hbar^2}$. Таким образом, все что относится к потенциалу, в частности $U^{(2)}$, на атомной шкале – это величина порядка единицы. Масса же на атомной шкале величина очень большая.

Как помним, масса протона в 2000 раз больше массы электрона. Если говорим об атомах, то в них протонов типично много. Тогда массу будет брать порядка $10^4 - 10^5$.

$$\Omega \sim \sqrt{\frac{m}{M}} \sim 10^{-3} - 10^{-2}$$

Если вернуться к графику, то можно отметить, что уровни идут часто по сравнению с глубиной ямы. На глубине ямы влезает большое количество уровней. На практике те численные факторы, о которых говорили, немного уменьшают влияние малости. Получаем тогда:

$$\Omega \sim 10^{-2} - 10^{-1}$$

В колебательном спектре присутствуют несколько десятков спектров колебательных уровней. Но их все равно много. Характерные колебательные частоты малы по сравнению с характерными электронами.

Выводы: 1) эти частоты находятся не в оптическом, а в инфракрасном диапазоне. Примерно, на два порядка меньше оптических частот переходов.

2) если уровни идут часто, то первый из них не далеко отстоит от дна ямы. По крайней мере для начала спектра приближения работающие вблизи минимума должны выполняться хорошо.

Важный результат – это фундаментальная малость, определяющая малость частот в колебательном спектре по сравнению со спектром электронов.

Рассмотрим вопрос: как устроены колебательные спектры вообще? Если есть молекула не двухатомная, а состоящая из многих атомов, то нужно найти минимум энергии, как функцию от координат всех атомов. Потом посмотреть, как вблизи минимума потенциал устроен, найти матрицу, определяющую вариацию энергии при изменении координат. Эту матрицу нужно диагонализировать, как делается в механике. В итоге найти собственные частоты молекулы.

Общее число колебательных степеней свободы

$$N_{\text{кол}} = 3N_{\text{ат}} - 3 - 3 = 3N_{\text{ат}} - 6$$

где 3 степени свободы отвечают поступательному движению, а 3 – колебательному.

Исключения составляют линейные молекулы. Например, углекислый газ (CO_2). Если атомы расположены на одной линии, то вращать вокруг этой самой линии невозможно. Это значит, что для линейных молекул будет 2 степени свободы отвечать колебательному движению. Тогда:

$$N_{\text{кол}} = 3N_{\text{ат}} - 5$$

Если представить большую молекулу, то как устроены колебательные частоты на одном краю молекулы слабо связаны с другим ее краем. Колебательные частоты – это свойства компактных групп атомов. Таким образом, если померить колебательный спектр молекулы, то можно понять и проанализировать химический состав этой молекулы. Это изучают в колебательной спектроскопии (КС). Оно имеет преимущества по сравнению с химическими методами исследования. КС – неразрушающий, дистанционный метод.

Лекция 9. Системы многих частиц

Рассматривали ранее молекулярные колебания. Характерный график для зависимости потенциала от расстояния с минимумом и с колебательными уровнями молекулы вблизи минимума.

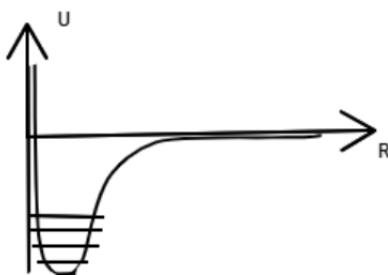


Рис. 9.1. Колебательные уровни

Важный вывод состоял в том, что уровни колебательного спектра идут достаточно часто. Умещается типично несколько десятков уровней на энергетическом масштабе. В результате появляется малый параметр:

$$\sqrt{\frac{m}{M}}$$

где m – масса электрона, а M – масса молекулы.

Значит, в меру малости этого параметра, уровни идут часто. Собственно говоря, именно наличие этой малости позволяет «оправдать» гармоническое приближение для колебательных степеней свободы, которое было сделано. Вблизи минимума любой потенциал раскладывается в ряд Тейлора, но применять это разложение можно только, если характерный линейный масштаб, на котором локализована соответствующая волновая функция молекулярных колебаний, достаточно мал. Поэтому малость этого параметра гарантирует применимость такого приближения.

Собственно говоря, сама эта кривая своим существованием в физике оправдана наличием малого параметра. Действительно, малое энергетическое расстояние между уровнями означает на электронном масштабе большой период колебаний, а маленькое по энергии расстояние значит большое время. Это, свою очередь, физически значит следующее: пока колеблются ядра атомов, образующие молекулы, электроны, со своим быстрым временным масштабом, каждый раз перестраивают свою структуру и свои волновые функции под текущие расстояния между ядрами. Таким образом,

не только если «прибить гвоздями» на заданном расстоянии ядра и померить между ними энергию электронной конфигурации, но и если отпустить ядра, эта кривая остается практически неизменной. Все происходит потому, что электроны успевают отслеживать медленное на электронной шкале, на масштабе атомного времени колебания молекулярных степеней свободы.

Таким образом, можно считать, что с точки зрения электронов, потенциал, определяемый положениями ядер, меняется адиабатический медленно и сам малый параметр принято называть малым параметром адиабатического приближения в теории твердого тела.

После этого говорили о том, что, если есть уровни, значит между ними возможны переходы. Переходы соответствуют инфракрасной и даже в достаточно глубокой инфракрасной области спектра. И, исследуя структуру линии соответствующих переходов, можно судить о структуре того, что колеблется, о химическом устройстве молекул, на которые смотрим. Таким образом, возможно проводить неразрушающий дистанционный анализ для тех или иных образцов.

В этот момент надо сделать оговорку, потому что молекулы имеют право не только колебаться, но и вращаться. И до того, как начнем говорить про колебательную спектроскопию стоит подумать о том, как возможно вращение молекулы модифицирует картину спектра.

Оговоримся, что к счастью для колебательной спектроскопии вращения идут во вред. Но для нее существует очень частная ситуация, когда вращение отсутствует. Это ситуация, когда наблюдают спектр молекул, растворённых в той или иной жидкости. Легко представить, что, если молекула находится в жидкости, то колебаться у неё ещё получается, а вращаться точно нет. Окружающая её жидкость обладает вязкостью, и, конечно, свободного вращения быть не может. Поэтому для растворов типичны чисто колебательные спектры, а вот если речь идет о газах, то надо учитывать вращения молекул.

Вращательный спектр молекулы

Посмотрим, что можно сказать по поводу вращающихся объектов. На самом деле, можно сказать многое. Знаем, как ведёт себя ключевая характеристика вращающихся тел – момент импульса. Момент импульса и одна из его проекций квантуются. Запишем квадрат момента, который является квантующейся величиной

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1)$$

Эта формула была получена, конечно, для движения в центральном поле, но по смыслу вывода ясно, что совершенно неважно о вращение чего идёт речь.

Значит l – целое число.

Для того, чтобы теперь определить спектр вращательного движения молекул, если абстрагироваться от специфики связанной с анизотропией, нужно всего лишь одна формула. Эта формула определяет энергию вращательного движения, если известен квадрат момента.

$$E_{\text{вр}} = \frac{L^2}{2J}$$

В знаменателе фигурирует M , которая обозначает величину, которая называется момент инерции.

Значит, момент инерции вращающегося тела по порядку величины характеризуется

$$Y \sim R^2 M$$

где R – размер, m – типичная масса атома, составляющая молекулу.

Посмотрим на эту формулу с точки зрения наличия малостей. Малость, которую можно ожидать, это конечно, опять малость отношения массы электрона и массы ядра. Скорости света в этой формуле нет и не предвидится, а других малостей, кроме как в корне из соотношения масс и постоянной тонкой структуры, нет. L^2 – величина малости, фундаментальных малостей не содержит. R^2 – размер молекулы, который больше, чем радиус Бора. Но эта малость не фундаментальная, а численный фактор определяемый, условно говоря, количеством атомов в молекуле, номером атома в Периодической таблице Д.И. Менделеева. Фундаментально большой величиной будет только одна – момент инерции J . Значит $E_{\text{вр}}$ можно очень грубо оценить, как величину, содержащую в первой степени отношение масс умноженное на $E_{\text{ат}}$.

$$E_{\text{вр}} = \frac{L^2}{2J} \sim \frac{m}{M} E_{\text{ат}}$$

Видим, что если, когда говорили о колебаниях, то малость по сравнению с оптическими частотами – это корень из отношения масс. Значит, фактор порядка, условно говоря, 0,01. Если речь идет о вращении, то отношение масс в первой степени значит $10^{-5} - 10^{-4}$ фактор. По сравнению с атомными частотами, очень глубокие инфракрас скорее ТГц, и, конечно, если предположить чему равна эта величина по

сравнению с энергией тепловых колебаний с КТ. Если электрон-вольты – это атомный масштаб энергии, 10^{-4} от электрон-вольта. Доли миллиэлектрон-вольта – это гораздо меньше, чем КТ при комнатной температуре. Примерно, 0,03 электрон-вольта. Много десятков вращательных уровней заселены просто за счет теплового фона, за счет теплового движения молекул. Линии очень близки. Всё это приводит к тому, что, если разрешать молекулам вращаться, то вращательный спектр представляет собой некие полосы. Смешиваются колебательные и вращательные степени свободы получается сильно размытый колебательно-вращательный спектр. Отдельных вращательных линий незаметно, они слишком часто идут.

К счастью для физиков, которые используют спектроскопические методы, для материалов и веществ, находящихся в жидкостях, вращательного спектра нет. Есть колебательные линии, они четко видны, а значит их можно идентифицировать.

Комбинационное рассеяние. История присуждения нобелевской премии за комбинационное рассеяние

Более того, известен оптический процесс, позволяющий транслировать инфракрасные частоты колебательных переходов в оптическую часть спектра. Такой процесс называется комбинационное рассеяние, и выглядит он, условно говоря, следующим образом:

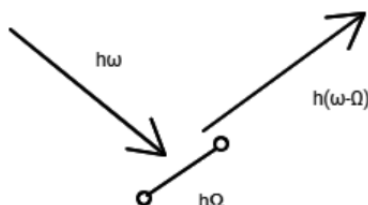


Рис. 9.2. Комбинационное рассеивание

То есть, есть молекула и она может колебаться с собственной частотой $h\Omega$, соответствующая молекулярным колебаниям. Она маленькая и лежит в инфракрасной области. Пусть падает фотон, который несёт частоту $h\omega$. После этого он возбуждает молекулярное колебание, высвечивается частота $h(\omega - \Omega)$ и кванты с меньшей энергией улетают, а молекулярные колебания возбуждаются. Фотон, условно говоря, делится на две части. Большая улетает, унося почти всю энергию, но всё-таки не всю, а кусочек энергии. А квант молекулярных колебаний остаётся в исследуемом образце.

Возможен и противоположный процесс типичная энергия колебания степеней свободы сравнимы с КТ, поэтому есть шанс, что прилетевший оптические фононы встретят молекулу, которые уже колеблются и отберет у неё один квант молекулярных колебаний. Тогда ширина линия, тогда спектральное положение линии высвеченной оказывается сдвинута в противоположную сторону. Увеличивается частота падающего света и равна $\hbar(\omega + \Omega)$. Значит, назовем:

$\hbar(\omega - \Omega)$ – стоксова компонента

$\hbar(\omega + \Omega)$ – антистоксова компонента

Рассмотрим вопрос: что нужно для того, чтобы наблюдать комбинационное рассеяние света? В первую очередь, конечно, хороший монохроматический источник и хорошее средство детектирования, позволяющее в спектре разрешать, соответствующие линии. Они не очень далеко стоят в накачке, но гораздо слабее. Накачка – это то, что падает на монохроматический источник.

Это было развито уже в лазерную эпоху. В первую очередь с высокой степенью монохроматизм, источники света, а потом и лазеры. Тем не менее, открыто комбинационное рассеяние было только в 20х годах XX века. А исследования, от первых намёков до четкого детектирования, соответствующих спектральным компонентам, сдвинутых относительно накачки, заняли примерно лет 10. Они велись одновременно и абсолютно независимо двумя группами. Это группа Рамана в Индии и группа Ландсберга и Мандельштама в МГУ (Россия).

Результаты были получены одновременно и с точностью до нескольких недель. Но относились к совершенно разным исследуемым системам. В одном случае, это была твердотельная система, в другом случае – жидкость. То есть, тот факт, что результат получен одновременно и независимо, не вызывает никаких сомнений. Тем не менее с фактом о приоритете связана история обнаружения комбинационного рассеяния.

В иноязычной литературе это явление называется рамановским рассеиванием, то есть приоритет отдали Раману. Ему же присудили и Нобелевскую премию. По этому поводу, конечно, имеется некоторая обида у отечественного научного сообщества, в частности, в университете. На историю присуждения Нобелевской премии свет оказался пролит сравнительно недавно. Дело в том, что Нобелевский комитет открывает только через 60 лет архивы. И вот через 60 лет после 30ого года стало известно, кто и как голосовал, когда эта премия присуждалась. У нобелевского комитета процедура двух стадийная, она и до сих пор такая. По миру рассылается несколько тысяч писем с просьбой назвать своих кандидатов, потом то, что пришло анализируется, собирается некая статистика и уже члены нобелевского комитета с

этим, скажем так, коротким списком, работают. Количество голосов за Рамана было гораздо больше и голоса эти были, скажем так, весомее. Это были, действительно, первого уровня физики, которые призывали Раману присудить Нобелевскую премию, а за Мандельштама и Ландсберга всего двое голосовали наших людей. Речь идет не о том, что Нобелевский комитет как-то несправедливо выступил, при таком мнении научного сообщества, он по-другому и поступить не мог. Речь идет о том, что, как сейчас принято говорить, недостаточно хорошо был организован PR. И отечественное научное сообщество не проявило единодушия в области высокой оценки этой работы. Коротко говоря, эффект чисто социальный и речь идет скорее про то, как устроена отечественная наука, а не про то, как несправедливо Нобелевский комитет выступил. Но, тем не менее, вот такое расстройство и по сию пору беспокоит научное сообщество. В русском языке термин рамановское рассеяние не используется, а используется термин комбинационное рассеяние.

На этом мы заканчиваем разговор про молекулярные колебания, про молекулярные уровни и переходим к свойствам твердых тел.

Кристаллическая решетка

Ранее говорили про колебания молекул, сейчас рассмотрим колебания решетки. Знаем, что кристаллы – это периодические в пространстве структуры. Атомы образуют некую решётку. Нарисуем простейшую квадратную, чередующуюся решетку.

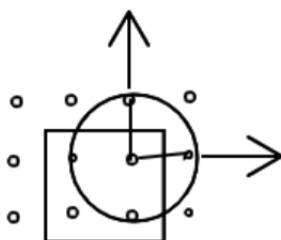


Рис. 9.3. Простейшая решетка

Если трехмерный аналог нарисовать, то получится кубическая решетка. Чисто простых кубических структур в природе не бывает. Кристаллы в природе устроены сложнее, либо это двухатомные системы типа натрий хлор, либо, если это кристаллы, сделанные из атомов одного сорта, как металлы, то они группируются не в простую кубическую, а в другие структуры. Впрочем, с кубической симметрией. И давайте вспомним математическое определение, что такое периодическая решётка – это

система, в которой можно выделить некий объем, периодическим повторением которого получается вся решётка. Минимальный такой объём называется элементарная ячейка, а векторы, на которые его надо двигать для того, чтобы решётка получилась, это векторы трансляций. Вот тут видно два базисных вектора таких, что получается двумерная структура. Если же рассмотреть в трёхмерном, то их три.

Значит, если посмотреть на кристалл в целом, то элементарные векторы составляют трансляцию – это то, что переводит кристалл в самого себя. Их три штуки. Значит, если эти элементарные векторы известны, то не сложно восстановить, как выглядит элементарная ячейка кристалла, и понять какой симметрией этот кристалл обладает.

Вооружившись знаниями о существовании малого параметра адиабатического приближения, понимаем, что можно рассматривать колебания ядер. Эти ядра будут колебаться с типичными временами, много большими, чем характерные времена электронной подсистемы. Поэтому электроны будут успевать отслеживать положение ядер. Коротко говоря, можно ввести эффективный потенциал, определяющий энергию кристаллов в зависимости от положения ядер.

$$U(r_1 \dots r_N)$$

где $r_1 \dots r_N$ – это координаты соответствующих ядер. Найти у этой функции минимум. Вблизи этого минимума разложить в ряд Тейлора. Первого порядка по отклонению не будет, потому что наблюдается минимум. Значит будет некая квадратичная форма. И опять, найдя собственные колебания этого набора гармонических осцилляторов, можно найти, как выглядят спектры колебаний кристаллов. Задача обозримая, но пока, конечно, довольно абстрактная. Это система очень большого количества переменных, надо диагностировать огромную матрицу.

Одномерная цепочка атомов. Фононы

На самом деле, ситуация становится существенно более ясной, если явным образом учитывать, что кристалл – это периодическая в пространстве структура. Для того, чтобы это показать, давайте рассмотрим простейшую модель кристалла: одномерную цепочку со взаимодействием между ближайшими соседями.

Масса каждого из узлов M . Пусть они будут одинаковые. Жесткость каждой из пружинок равна k . Таким образом, перед нами система с потенциальной энергией. Запишем гамильтониан:

$$H = \sum \frac{p_j^2}{2M} + \sum \frac{k(X_j - X_{j+1})^2}{2}$$

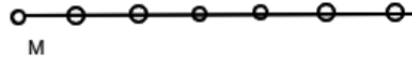


Рис. 9.4. Одномерная цепочка

Решим сначала классическую задачу. Классическая задача – уравнение движения. MX''_j – это сила, действующая на соответствующий атом со стороны соседей, их два X_j, X_{j+1} , соответственно, налево и направо пружинки. Введём, что такое X – это смещение x_1, x_2 и т.д. от положения равновесия, это не координаты. Значит, k – сила, действующая со стороны правого например соседа.

$$MX''_j = -k(X_j - X_{j+1} + X_j - X_{j-1})$$

Получается система из большого количества таких однотипных уравнений, которая подлежит решению. Надо придумать в каком виде искать решение. Оно будет в виде плоской волны:

$$X_j(t) = e^{i(kaj - \omega t)}$$

Надо действительную часть взять от этой экспоненты. Записывая комплексную экспоненту, подразумеваем, что действительная часть взята проще:

$$\begin{aligned} X''_j &= -X_0 \omega^2 e^{i(kaj - \omega t)} \\ X''_{j\pm 1} &= (X_0 e^{ika} e^{i(kaj - \omega t)}) e^{\pm ika} \\ M\omega^2 &= -k(e^{ika} + e^{-ika} - 2) = 2k(1 - \cos ka) \\ \omega &= \sqrt{\frac{2k}{M}(1 - \cos ka)} \end{aligned}$$

Даже не зная формулы половинного угла, можно увидеть, что вблизи маленьких частот равен нулю косинус. В нулевом члене – это 1, а последующий член – это оканчивается линейный член. И пока стоит корень, ω в любом случае пропорционально модулю k , а если вспомнить всё-таки формулу с половинным углом, то получается:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{M}} 2 \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$$

Это только часть графика относящаяся к промежутку $-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}$, потому что имеем дело с дискретной цепочкой и легко убедиться, что выходить за пределы этого отрезка, который называется первая зона Бриллюэна, смысла нет.

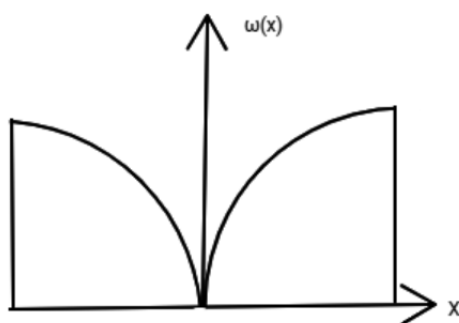


Рис. 9.5. Зависимость ω от k

Решение по модулю больше, чем $\frac{\pi}{a}$ и неотличимо от решений, находящихся внутри этого отрезка. Действительно, посмотрев, если прибавим $\frac{\pi}{a}$, то это ничего не изменит в формуле, потому что 2π умноженное на целое число и на мнимую единицы – это показатель экспоненты, который дает саму экспоненту, просто равную нулю.

$$e^{i(kaj - \omega t)} = e^{i((k + \frac{2\pi}{a})aj - \omega t)}$$

$$e^{2\pi} = 1$$

Таким образом, только в пределах определённого отрезка имеет смысл звуковые волны вводить. Звуковые волны – колебания атомов решетки и это звук. Пока была классическая модель, классические колебания и появились звуковые волны, обладающие дисперсией $\omega(k)$. В области малых k дисперсия линейна:

$$\omega = Vk$$

Коэффициент V имеет размерность скорости и, конечно, является привычной скоростью звука. Теперь имеем возможность понять, почему скорость звука в твердом теле по порядку величины такая, как привыкли. В формулах стоит масса молекулы в знаменателе, таким образом, следует ожидать, что звуковая скорость отличается от атомного масштаба скорости фактором $\frac{m}{M}$. Повторюсь речь идет не о газах, а о кристаллах. Корень из отношения масс – величина на уровне $10^{-3} - 10^{-2}$ от атомной скорости. Тогда от привычной скорости света возьмем ещё постоянную тонкой структуры, учтем их, ещё два порядка долой. На 4-5 порядков скорость звука в кристаллах должна оказаться меньше, чем скорость света. Скорость света в системе СИ – это $3 \cdot 10^8$, значит, таким образом, 4-5 порядков долой. Получим 10^4 м/с. Возможно, в реальности значение несколько меньше, примерно, 10^3 км/с.

Рассмотрели пример с одномерной цепочкой и ближайшими соседями. Он показательный. Он позволил получить много результатов физически значимых, но и

в достаточной степени общих. Несложно убедиться, например, рассмотрев цепочку с каким-то более сложным взаимодействием через соседа, введя взаимодействие такое, что во всех случаях дисперсия звуковых волн в области малых значений волновых векторов получается линейной. То есть звук существует в любом твердом теле независимо от конкретного закона взаимодействия атомов в нём. Одномерность тут тоже не принципиальна. Если рассмотреть трехмерную решетку, получится всё то же самое, за небольшим исключением. Из-за того, что в трёхмерье у атома есть три степени свободы, смещения – это вектор с тремя компонентами. И, вообще говоря, в твёрдом теле существует, для заданного, не одна акустическая мода, а три. Если k – это вектор, который смотри вдоль, то в простейшем случае – это моды, в которых атомы отклоняются в двух осях перпендикулярно волновому вектору и для третьей – параллельно волновому вектору. Соответственно, продольные и поперечные звуковые колебания присутствуют в твердом теле, в газах и жидкостях, напомним, только одна из этих ветвей – продольная. Значит дело в том, что твёрдые тела обладают свойством упругости, которого жидкостей нет. Сдвинуть относительно друг друга два слоя жидкости ничего не стоит, а в твёрдом теле возникает при этом возвращающая сила.

Таким образом, в случае общего положения есть три ветви колебаний. Каждая характеризуется своей скоростью звука, но более сложной, чем линейная или простой синус, дисперсией при не малых значениях k .

Возникает вопрос: что делать для того, чтобы учесть квантовый характер движения ядер в твердом теле? На самом деле ничего особенного делать не надо, эту задачу практически знаем. Есть некая среда, в ней есть собственные моды имеющие вид плоских волн, характеризующихся с заданным законом дисперсии. Такую задачу уже решали.

Есть среда, в которой имеются собственные моды с заданным законом дисперсии. Такую задачу решали ранее, когда выводили формулу Планка. В вакууме присутствуют фотонные моды, у которых есть закон дисперсии. Он линейный вблизи начала координат, только там скорость света, а не скорость звука и две различных моды, соответствующие одному и тому же значению поляризации.

Для того, чтобы учесть квантовый характер объекта, нужно сообщить, что каждая из этих мод представляет собой эффективный гармонический осциллятор. Система линейная, множество гармонических осцилляторов. Этот гармонический осциллятор, если речь идет о тепловом движении, заселен в соответствии со статистикой Бозе-Эйнштейна.

Конечно, приближение это не настолько хорошо, как в случае оптики. Фотоны, как говорили ранее, – эта система не взаимодействующих друг с другом ангармони-

ческих осцилляторов с очень хорошей точностью. Здесь же, если разогнать сильно звуковые моды, то нелинейность почувствуется достаточно быстро. В качестве базового приближения, тем не менее, конечно, указанное работает.

Итак, есть набор гармонических осцилляторов. Каждый из них заселен квантами колебаний. Есть статистика Бозе-Эйнштейна:

$$\langle n_\omega \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

Чтобы учесть энергию:

$$\langle E \rangle = \hbar\omega \langle n_\omega \rangle$$

Если от нулевых колебаний всё отсчитывать:

$$\langle E_\omega \rangle = \hbar\omega \langle n_\omega \rangle$$

Действительно, нужно взять вывод формулы Планка и повторить всё, что записано там, но, фактически, вместо скорости света взять скорость звука. Ничего другого не поменяется.

Есть, однако, принципиальное отличие. Оно состоит в том, что число степеней свободы в кристалле отлично от числа степеней свободы оптического поля. Значение k может быть сколь угодно большим. Поэтому ультрафиолетовой катастрофы в этой теории никогда нет, не было и не будет. Математически этот факт выражается в том, что k всегда находится в одномерном случае в пределах отрезка $-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}$. В трехмерном случае же – в пределах некоего многоугольника, который называется зона Бриллюэна.

Важно то, что k пробегает конечный ряд значений. Число возможных значений можно посчитать очень просто. Необязательно для куба, конечно, это вопрос, как устроена решётка конкретно кристалла. Число возможных значений k посчитать очень просто. Для этого нужно узнать, сколько есть степеней свободы у той системы, с которой начали. А начали с кристалла. Если в нём есть N атомов, то число степеней свободы равно $3N$. В итоге, просто перешли к другим переменным. Число акустических колебаний отличных друг от друга в кристалле тоже должно быть равно $3N$ ни больше, ни меньше. Возможно, меньше на тройку, если хотим учесть возможные поступательные движения кристаллов. Получаем три ветви, где в каждой из ветвей N возможных колебаний.

Таким образом, важнейшее качественное отличие, как принято говорить, ультрафиолетового обрезания – волновые вектора. Они не могут быть сколь угодно большими. И есть второе отличие, количественное, но тем не менее очень существенное, – скорость звука. Между скоростью света и скоростью звука, как говорили, разница на 4-5 порядков. Она входит в знаменателе в высокой степени: третья или четвертая. Появляются, поэтому, соответствующие величины, конечно, количественно очень сильно отличающиеся от того, что было, когда работали с газом фотонов.

Термодинамика фононного газа

Рассмотрим термодинамику фононного газа. Квантованные звуковые волны принято называть фононами, чтобы понять основы теории, которую построил в 1911 году Дебай.



Рис. 9.6. Дебай Петер, Нидерландский физик и химик

Дебай ввёл следующие простые предположения. Давайте используем всю информацию, которая уже есть. Её немного, но используем её наилучшим образом. Что знаем точно про кристалл? Конечно, знаем скорость звука. Можно её померить. Как закон дисперсии отклоняется от линейного для конкретного кристалла, конечно, не знаем и знать не можем. Поэтому, сказал Дебай, будем считать закон дисперсии линейным с заданной звуковой скоростью, известной из эксперимента для всех значений k . Далее рассмотрим некий сложный многогранник зоны Бриллюэна. Какой он будет для конкретного кристалла, ещё надо выяснять. Во времена Дебая, это не было известно вовсе. Зато, знаем сколько есть степеней свободы для кристалла. Давайте вместо истинной зоны Бриллюэна введём сферическую. Ограниченное значение $k - k_D$ (дебаевская) установим таким образом, чтобы общее число степеней свободы получалось правильным.

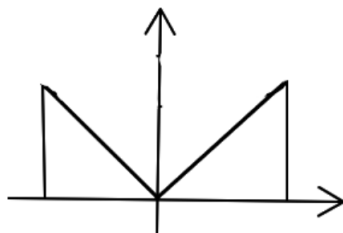


Рис. 9.7. Линейный закон дисперсии

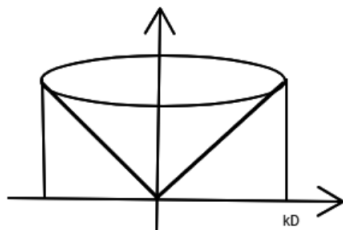


Рис. 9.8. Сферический закон дисперсии

Ранее считали сколько плоских волн уместится в заданном пространстве волновых векторов, когда выводили формулу Планка. На одну плоскую моду приходится $(\frac{2\pi}{L})^3$ – объём. Таким образом, число степеней свободы, которые внутри этой сферы:

$$N = \frac{4}{3}\pi k_D^3 \frac{L^3}{(2\pi)^3}$$

Получили выражение для одной поляризации. Значит, если знаем чему равно число атомов, что есть произведение концентрации на куб длины, то можем найти k_D . Ученые это прекрасно могли сделать и в начале XX века.

Теперь возьмем формулу для энергии для набора гармонических осцилляторов с линейной дисперсией, которые знаем из вывода формулы Планка, и посчитаем теплоёмкость вот такой системы. В отличие от оптики, в отличие от фотонного газа, нужно посчитать именно теплоёмкость – производную по температуре от полной энергии системы. Это то, что меряют экспериментаторы, если говорить про твёрдые тела:

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

В рамках нашего курса мы не будем рассматривать аккуратно модель Дебая. Рассмотрим два предельных случая. И посмотрим, как известное нам физика связана с вымораживанием степеней свободы в данном случае оказывается существенной.

Напомним, если речь идет про один гармонический осциллятор, находящийся при заданной температуре, то существует два режима.



Рис. 9.9. Режимы

Первый режим:

$$kT \gg \hbar\omega$$

Задействовано много уровней. Энергия этого одного гармонического осциллятора определяется классическим выражением:

$$\langle E_{\hbar\omega} \rangle = kT + E_0$$

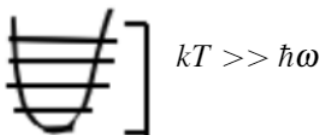


Рис. 9.10. Первый режим

Если же:

$$kT \ll \hbar\omega$$

Степень свободы выморожена и с точностью до экспоненциально-малых поправок:

$$\langle E_{\hbar\omega} \rangle = E_0$$

В термодинамику эта степень свободы вклада не вносит.

У нас осцилляторов много, но ясно, что опять можно рассмотреть два случая. Если ввести дебаевскую частоту:

$$\omega_D = V k_D$$

и соответственно дебаевскую температуру

$$kT_D = \hbar \omega_D$$

Рассмотрим два случая: температура много меньше дебаевской и температура много больше дебаевской. Случай номер один:

$$T \gg T_D$$

Все гармонические осцилляторы, которые в системе есть, оказываются в высокотемпературном режиме. Вновь для фотонного газа такой режим просто невозможен, всегда какую бы высокую температуру не поставь, всегда найдутся степени свободы, которые выморожены, потому что спектр бесконечно уходит в бесконечность. Тут число степеней свободы ограничено. Спектр ограничен сверху. Если температуру поднять достаточно высоко, все осцилляторы оказываются в классическом режиме. Значит полная энергия:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= NkT \\ \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} &= \text{const} \end{aligned}$$

Второй более интересный.

$$T \ll T_D$$

Вернемся к графику.

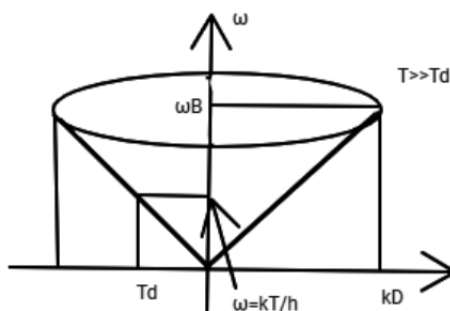


Рис. 9.11. Зависимость ω от температуры

Значит

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

В этом случае вымороженные моды есть. Ситуация, вообще говоря, совсем перестает отличаться от того, что знаем про газ фотонов. Если какие-то степени свободы лежат существенно ниже этой границы, степени свободы не выраженные и они вносят вклад в термодинамику. В них запасена энергия, те остальные степени свободы, которые лежат наверху, каждые находятся в своем основном состоянии. Их вклад в термодинамические свойства пренебрежимо мал.

Остаётся посчитать сколько таких, дающих вклад термодинамику, мод есть. Волновой вектор, который ограничивает пространство этих мод, которые работают, это:

$$k = \frac{kT}{\hbar V} = \frac{\Theta}{\hbar V}$$

Значит, число задействованных в нём степеней свободы

$$\left(\frac{kT}{\hbar V}\right)^3$$

В каждой из этих степеней свободы запрещена энергия

$$\langle E \rangle = \left(\frac{kT}{\hbar V}\right)^3 kT$$

Все остальные вышележащие степени свободы ни при чём. Энергия пропорциональна четвертой степени температуры.

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \sim T^3$$

Если диэлектрический кристалл, в котором электроны на термодинамику влияния не оказывают, охладить достаточно низко, то будет классический характер зависимости энергии от температуры. Классическое выражения для теплоёмкости сменится существенно квантово-механическим.

Рассмотрим несколько вопросов. Первый вопрос, который должен задать физик, какой экспериментальной ситуации это отвечает. То есть, какой, хотя бы по порядку величины, является температура Дебая. Что такое температура много больше температуры Дебая и много меньше температуры Дебая с точки зрения экспериментатора?

Можно прикинуть. Температура Дебая на атомной шкале энергий – это малая величина, по скольку малой является величина скорости звука. Таким образом, температура Дебая $\sqrt{\frac{N}{M}}$ меньше, чем электронная энергия. Электронная энергия – это электрон-вольт, два порядка долей, 10^{-2} электрон-вольта, может быть немножко больше, температура Дебая получается. Комнатная температура имеет тот же самый порядок. Значит, экспериментатор замечательно может дебаевскую физику увидеть.

Второй вопрос. Насколько оправдано предположение, которое Дебай сделал. Предположение то очень сильное, линеаризация закона дисперсии во всей области и искусственная сферическая зона Бриллюэна. В общем случае, это многогранник. Закон дисперсии при этом другой совершенно. С точки зрения экспериментальных свойств, по крайней мере простых кристаллов, диэлектрических кристаллах формула Дебая ведёт себя великолепно. Дело в том, что это, так называемая, интерполяционная формула, которая имеет две заведомо правильные асимптотики. Их только что рассмотрели.

Действительно, рассмотрим сначала случай низких температур. В этом случае всё, что требуется знать, характер дисперсии в той области, которая дает вклад в термодинамику в области малых k и тут линейное приближение для закона дисперсии должно работать хорошо. Тот факт, что все выше лежащие моды выморожены. В этой области совершенно неважно, как идёт кривая на самом деле при больших k . Всё равно, всё что надо знать это то, что эти частоты достаточно большие по сравнению с kT , соответствующие степени свободы не населены. Поэтому, в области маленьких температур, теорию Дебая используют, фактически, только в низкоэнергетической части спектра и она работает заведомо правильно.

Теперь, давайте, обратимся к высоким температурам. Вроде бы там тоже приближения все эти должны нарушаться. Но ничего подобного. В области высоких температур единственное, что, фактически, используется теорией Дебая – это знание о количестве степеней свободы и тот факт, что все эти степени свободы становятся классическими. Совершенно неважно опять, как устроен закон дисперсии. Число звуковых мод – это $3N$ и в каждой из них kT . Но уж если и в области маленьких температур правильный ход, то и в области высоких температур будет правильный ход. Можно посередине протянуть без существенных особенностей кривую, что не составляет труда.

Поэтому теория Дебая – это хороший пример того, как минимальными средствами можно сделать хорошую физику.

Между прочим, существует ещё теория теплоемкости Эйнштейна. Она на 3 года раньше была открыта и в большинстве случаев совершенно никуда не годится. Эйнштейн предположил, что все фононы имеют одну и ту же фиксированную частоту. А

теплоемкость по Дебаю – это хорошая рабочая формула и первое, что надо выяснять, если говорить про тепловые свойства твёрдых тел это то, какая у данного твердого тела температура Дебая и скорость звука. После этого, узнав концентрацию атомов, знаем практически всё о кристалле.

Наконец последнее, скорость звука в третьей степени находится в знаменателе, в соответствующих выражениях для фотонов, скорость света тоже в знаменателе. Различия V и c , как говорили ранее 4-5 порядков, и ещё в кубе, соответственно. В итоге получаем разницу в 9 - 12 порядков. И естественный вопрос, а также естественный ответ на вопрос, что больше теплоемкость фотонного газа или теплоёмкость фононного газа? Теплоемкость фононного гораздо больше, причем гораздо, это 12 порядков.

С обывательской точки зрения, когда надо запастись тепло, например в бане, то греют камни, а не колбы с вакуумом. Тем не менее, вопрос был поставлен абстрактно.

Электронные свойства твердых тел. Электрон в периодическом потенциале. Теорема Блоха. Основы зонной теории

Начнём говорить про электронные свойства твердых тел. Рассмотрим базовую задачу о движении электрона одной квантовой частицы в усредненном потенциале созданном остальными электронами и ядрами решетки. То есть мы должны записать и проанализировать свойства решения уравнения Шредингера

$$E\Psi = \frac{p^2}{2m}\Psi + U(r)\Psi$$
$$U(r) = U(r + R_n)$$

где R_n – один из трех векторов трансляции.

Сразу напишем базовые свойства решение этого уравнения. Если потенциал при сдвиге на R_n остается неизменным, то это означает, что присутствует волновая функция и что с ней происходит. Установлено, что волновая функция изменяется на фазу:

$$\Psi(r + R_n) = e^{\frac{ipR_n}{\hbar}} \Psi$$

Несложно записать выражение, которое заведомо удовлетворяет этому требованию

$$\Psi(r) = e^{\frac{ipr}{\hbar}} \varphi(r)$$

$$\varphi(r) = \varphi(r + R_n)$$

Так плоская волна – это то, что обеспечит возникновение фазового множителя на нечто периодическое на решетке, что не будет меняться при сдвигах. Выражение, если в него всмотреться, интуитивно понятно.

Удаётся доказать, что в бесконечном кристалле все решения уравнения Шрёдингера удовлетворяют движению электрона в периодическом потенциале кристалла. Они могут иметь только вот такой вид. Это утверждение носит название теоремы Блоха.

Рассмотрим ее подробнее. Величина p носит название квазиимпульса. Если бы она была импульсом настоящим, не было бы дополнительной периодической функции $\varphi(r)$. Поэтому называется квазиимпульс.

Квазиимпульс – это величина определённая не на все оси, а в пределах зоны Бриллюэна. В одномерном случае – в пределах участка $-\frac{\pi}{a} \dots \frac{\pi}{a}$. Задача теории состоит в следующем. Нужно найти точный квазиимпульс или хотя бы проанализировать вид зависимость спектра $E(p)$. Нарисуем координные оси

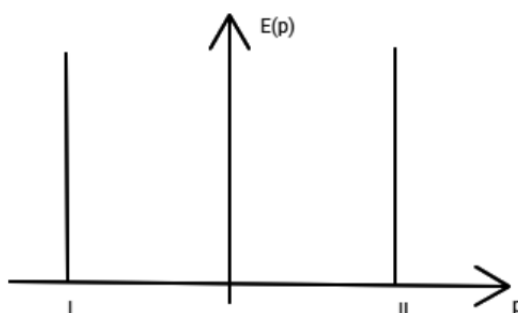


Рис. 9.12. Оси для нахождения квазиимпульса

В одномерном случае если был бы случай свободного пространства, p менялся бы по всей оси и получили бы $\frac{p^2}{2m}$. В случае кристалла не так.

Лекция 10. Квантовая электроника

Повторение: теорема Блоха

В прошлой лекции начали говорить о свойствах твердых тел, кристаллов. Самое главное в кристалле – это периодичность. Осветили свойство фононов, звуковых волн. Начали разговор про свойства электронного движения в кристаллах.

Рассмотрим теорему Блоха. Если есть уравнение Шредингера:

$$E\Psi = \frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi + U(r)\Psi$$

$$U(r) = U(r + R_n)$$

$$\Psi(r) = \varphi(r)e^{\frac{iqr}{\hbar}}$$

$$\varphi(r) = \varphi(r + R_j)$$

R_j – произвольный вектор трансляции. В частности, на любую из трех базовых можно сдвинуть потенциал и решетка перейдет в саму себя. Блоховская набивка тоже переходит в саму себя.

Закон дисперсии для свободной частицы. Квазичастицы

Есть еще фазовый фактор, который для случая частицы в вакууме только бы и присутствовал. Тогда величина q называлась бы импульсом в кристалле. По теореме это квазиимпульс. Такая величина похожа на импульс, но тождественно не совпадающая. Одно из очевидных отличий – квазиимпульс определен не на всей числовой прямой, а в пределах первой зоны Бриллюэна. Это отрезок $-\frac{\pi}{a}\hbar \dots \frac{\pi}{a}\hbar$. По вертикальной оси – закон дисперсии $E(q)$. Обсудим, как выглядит график, относящийся к кристаллу. Рассмотрим кривую, которая известна была ранее, – закон дисперсии для свободной частицы.

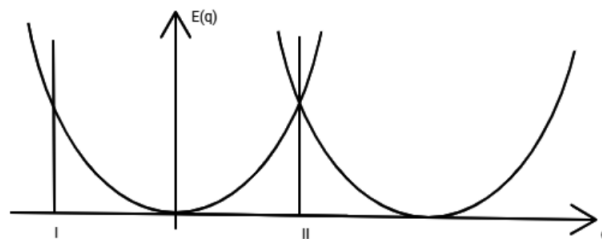


Рис. 10.1. Закон дисперсии для свободной частицы

Для простоты вычислений возьмем $U(r)$ в виде самой простой периодической функции, которую можно придумать.

$$U(r) = U_0 \cos k_0 r$$
$$a = \frac{2\pi}{k_0}$$

Запишем волновую функцию через теорему Блоха:

$$\Psi = \varphi(r) e^{\frac{iqr}{\hbar}}$$

Периодическую блоховскую набивку $\varphi(r)$ разложим в ряд Фурье. Получим тогда:

$$\Psi = e^{\frac{iqr}{\hbar}} \sum_k \varphi_k e^{ikr}$$

Нужно понять, какие значения пробегает вектор k . Раз $\varphi(r)$ – функция периодическая с периодом $\frac{2\pi}{k_0}$, значит k пробегает значения, отличающиеся на k_0 . Таким образом, получаем, что k может принимать значения $0, \pm k_0, \pm 2k_0, \dots$

Подставим полученное значение волновой функции в уравнение Шредингера:

$$E e^{\frac{iqr}{\hbar}} \sum_k \varphi_k e^{ikr} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \left(\frac{q}{\hbar} + k\right)^2 \varphi_k e^{i(k+\frac{q}{\hbar})r} + \frac{U_0}{2} e^{\frac{iqr}{\hbar}} \sum_k (e^{i(k-k_0)r} + e^{i(k+k_0)r}) \varphi_k$$

Наличие периодического потенциала приводит к тому, что разные пространственные гармоники в разложении $\varphi(r)$ друг с другом зацепились. При этом при φ_k стоят экспоненты с показателями $-k_0$ и k_0 .

Если попытаться вернуться к тому с чего начали, то это уравнение, для которого нужно определить энергию при заданном q и пространственные гармоники φ_k . Получили уравнение, содержащее бесконечное число неизвестных. В общем случае задача, если и решается, но трудна. Поэтому упростим ее радикальным образом и оставим только две пространственные гармоники.

Пусть

$$q \approx \frac{\pi \hbar}{a}$$

В этом случае квазиимпульс будет находиться в положительной области координат.

В этом случае оставим гармоники, соответствующие значению q при $k = 0$ и $-k_0$. Запишем явным образом уравнение:

$$E(e^{\frac{igr}{\hbar}}\varphi_0 + e^{i(\frac{q}{\hbar}-k_0)r}\varphi_{-k_0}) = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{q^2}{\hbar^2}e^{\frac{igr}{\hbar}}\varphi_0 + (\frac{q}{\hbar}-k_0)^2e^{i(\frac{q}{\hbar}-k_0)r}\varphi_{-k_0}) + \\ + \frac{U_0}{2}(e^{i(\frac{q}{\hbar}-k_0)r}\varphi_0 + e^{i(\frac{q}{\hbar}+k_0)r}\varphi_0 + e^{i(\frac{q}{\hbar}-2k_0)r}\varphi_{-k_0} + e^{\frac{igr}{\hbar}}\varphi_{-k_0})$$

Посмотрим, как разные члены в уравнение зависят от r . Они все перед собой содержат экспоненты и их 3:

$$e^{\frac{igr}{\hbar}}, e^{i(\frac{q}{\hbar}-k_0)r}, e^{i(\frac{q}{\hbar}-2k_0)r}$$

Совершенно ясно, что в точности выполнить нетривиальным образом уравнение невозможно. В одном единственном месте присутствует член с экспонентой, где $-2k_0$. Перед ним коэффициент, который не должен быть равен 0. Знаем, что φ_{-k_0} тоже не равен 0.

Но совершенно ясно, почему так происходит, почему математическая неприязнь произошла. Ровно потому, что пытаемся бесконечный ряд заменить двумя членами. Если бы еще члены выписывать для $k = -2k_0$, то появились бы следующие члены. Слагаемые с $e^{i(\frac{q}{\hbar}-2k_0)r}$ и $e^{i(\frac{q}{\hbar}+k_0)r}$ появились просто потому, что обрезали ряд. Поэтому, в рамках приближения с двумя единственными членами, нужно их выкинуть.

Что касается двух других экспонент. С ними математически все в порядке. Для того, чтобы уравнение выполнялось, требуем, чтобы слева и справа коэффициенты при соответствующих экспонентах были бы одинаковые. В итоге получаем:

$$E\varphi_0 = \frac{q^2}{2m}\varphi_0 + \frac{U_0}{2}\varphi_{-k} \\ E\varphi_{-k} = \frac{U}{2}\varphi_0 + \frac{(q-\hbar k)^2}{2m}\varphi_{-k}$$

Получили систему из двух уравнений с двумя неизвестными. Для того, чтобы она решалась, надо потребовать, чтобы существовал детерминант.

$$(E - \frac{q^2}{2m})(E - \frac{(q-\hbar k)^2}{2m}) - \frac{U^2}{4} = 0 \\ E^2 - E(\frac{q^2 + (q-\hbar k)^2}{2m}) + \frac{q^2}{2m}\frac{(q-\hbar k)^2}{2m} - \frac{U^2}{4} = 0 \\ E = \frac{1}{2}(\frac{q^2}{2m} + \frac{(q-\hbar k)^2}{2m}) \pm \sqrt{(\frac{q^2}{2m} - \frac{(q-\hbar k)^2}{2m})^2 + U^2}$$

Брэгговское условие рассеяния на решетке. Запрещенные зоны

Вспомним кривую – закон дисперсии для свободной частицы. Рассмотрим тривиальный случай при $U = 0$, соответствующий движению свободной частицы. Получившееся решение показывает два корня. Первый, если сам корень в решении взять с плюсом. То первое слагаемое сложится с коэффициентом, а второе сократится. В итоге получаем дисперсию частицы с $\frac{q^2}{2m}$. Второй, если взять с минусом, произойдет все тоже самое с точностью до наоборот. Первое слагаемое уничтожится, а останется второе с коэффициентом. В итоге получаем дисперсию частицы $\frac{(q-\hbar k)^2}{2m}$. Это та же самая парабола, только сдвинутая на величину зоны Бриллюэна.

Понятно, что происходит. Математика обеспечивает то, чтобы наш закон дисперсии квадратичный, который теперь формально определен на отрезке $-\frac{\pi}{a}\hbar \dots \frac{\pi}{a}\hbar$. Нужно, чтобы закон дисперсии вместил всю параболу. Если нужно ее загнать в конечный отрезок, то математика позволяет периодически повторять параболу. Если учесть пространственную гармонику, то получим

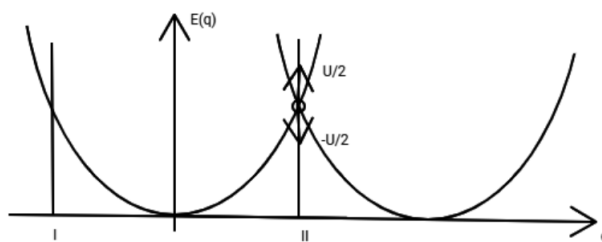


Рис. 10.2. Учет пространственной гармоники

Получили чистую математику при $U = 0$. Ничего другого, кроме закона дисперсии быть не может.

Рассмотрим ситуацию, когда $U \neq 0$, но значение небольшое. Посмотрим на точку $\frac{\pi}{a}\hbar$. Это точка, в которой

$$q^2 = (q - \hbar k)^2$$

Таким образом, под корнем в решении остается только слагаемое U^2 . Видим, что точка на графике, точка пересечения параболы и ее образа, находящаяся на границе зоны Бриллюэна, разъезжается на две. Одна «поехала» вверх, а другая вниз.

Если нарисовать всю прямую, то выглядит она следующим образом:
Сразу возникают вопросы. Первый из них: чем же граница зоны Бриллюэна так

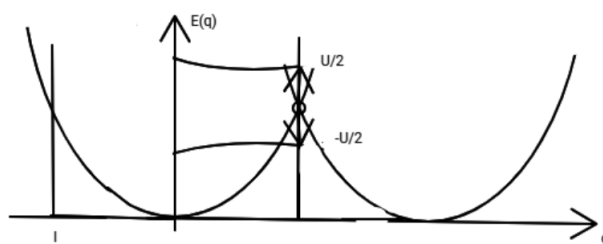


Рис. 10.3. Получившаяся зависимость

сильно выделена? Почему в этой области влияние периодического потенциала оказывается велико? Ответ был известен задолго до квантовой механики, известен оптикам. Он называется брегговское условие рассеяния на решетке.

Дело в том, что эта точка соответствует де Бройлевской волне, у которой пространственный период в 2 раза больше, чем период кристаллического потенциала U . Изобразим:

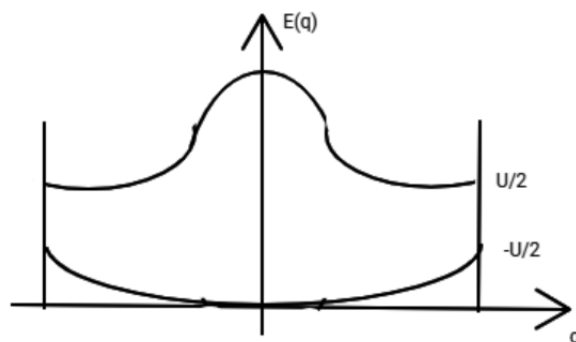


Рис. 10.4. Зависимость U от q

Пусть есть функция потенциала в виде косинуса. В системе движется волна и отражается от каждого из горбов решетки. Возникают вторичные волны, летящие в обратную сторону. Выполнение брегговского условия соответствует конструктивной интерференции этих вторичных волн. Если период исходной волны – это удвоенный период решетки, то «пробежав» период вперед и обратно, волна набирает один дополнительный собственный период. С точки зрения интерференции значит, что это та же самая волна. Если точно брегговским условиям откуда-то извне в кристалл запустив волну, то она никогда глубоко в кристалл не проникнет. Отраженные волны суммируются конструктивным образом и волна выталкивается из кристаллов.

Если рассмотреть многослойные диэлектрические зеркала, которые используются в лазерах, то они сделаны на этом принципе. Чередующиеся слои с разными показателями преломления, с подобранным периодом так, чтобы волна с нужной длиной

волны от этих слоев отражались. Это очень эффективные зеркала и имеют хороший коэффициент отражения.

Получаем тоже самое. Де бройлевская волна не может бежать даже если потенциал U слабенький. Если только период де бройлевской волны в пространстве в точности равен удвоенному периоду кристаллической решетки. Она эффективно начинает взаимодействовать с решеткой. На законе дисперсии это отражается сильным искажением его. Конечно, если U маленькое, то это расщепление не велико, но оно всегда присутствует.

Теперь становится ясно, почему оставили только две волны. Это именно точное или приближенное выполнение брегговского условия: одна волна находится в точке $\frac{\pi}{a}\hbar$, а другая – в $-\frac{\pi}{a}\hbar$. Другой же член будет находится очень далеко и не иметь отношения к физике, о которой говорим.

То, что обсуждаем, является только приближением. Можно понять и подумать, что оно хорошее для небольших величин кристаллического потенциала U_0 . Но физику оно охватывает отлично.

Зонная теория

Основной результат, который получили, состоит в том, что в случае движения частицы в периодическом потенциале в ее спектре возникает щель (запрещенная зона). В ней нет никаких значений энергии. Если посмотреть выше по энергии, то сразу возникнут следующие запрещенные зоны, соответствующие выполнению следующих брегговских пиков.

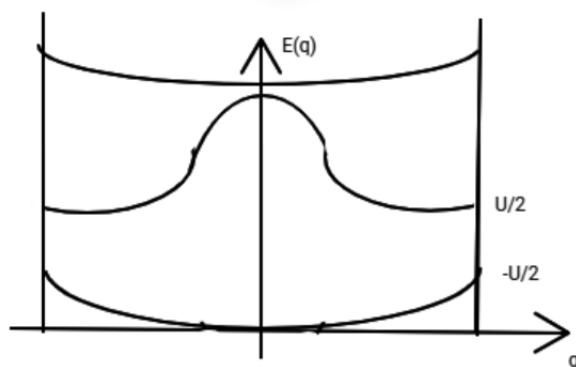


Рис. 10.5. Следующие уровни

До этого рассматривали спектры дискретные или непрерывный спектр с разрешенными энергиями всех значений больше 0. Существование запрещенных зон важно

методически и для физики твердого тела. Это связано с тем, что представление о разрешенных и запрещенных зонах лежит в основе простейшей теории проводимости – зонной теории металлов и диэлектриков.

Определим сколько электронов уместается в первой разрешенной зоне. Сколько есть свободных состояний для электронов? Если имеется кристалл длиной L , то волновой вектор принимает не произвольное значение, а значение из ряда:

$$\frac{q}{\hbar} = \frac{2\pi}{L} j \\ j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Получили такое же рассмотрение, как то, что было для расчета фотонных и фононных мод. Таким образом, на отрезке длиной $\frac{2\pi}{a}\hbar$ уместается

$$N = \frac{2\pi\hbar}{a} \frac{L}{2\pi\hbar} = \frac{L}{a}$$

Получаем, сколько периодов кристаллической модуляции в цепочке есть, столько есть и допустимых состояний в пределах первой разрешенной зоны, в которой может находиться электрон. Если же говорить более физически: сколько есть атомов, столько есть и состояний.

Представим, что решетка сделана из атомов. Ранее рассматривали цепочку, сделанную из атомов. У каждого такого атома есть один единственный электрон. Означает ли это то, что нижняя зона будет полностью заполнена законом дисперсии? Ответ: нет. У электронов есть спин. Состояние поэтому получится вдвое больше. Поэтому если у атома есть один электрон, то нижняя ветвь закона дисперсии будет заполнена только на половину. Если же будет два электрона на атом, то целиком. Если три, то уже на половину будет заполнена вторая ветвь и т.д.

В общем случае, нечетное число электронов на элементарную ячейку кристалла означает наличие на половину заполненной ветви закона дисперсии.

Частично заполненные зоны означают наличие металлической проводимости. Действительно, представим себе двумерную или трехмерную картинку. Совершенно ясно, что с точки зрения существования направленного движения электронов принципиально различается картины с частично заполненной зоной и с полностью заполненной зоной. Для того, чтобы возник ток нужно как-то деформировать кривую зависимости энергии от квазиимпульса. Так, как нарисовали выше, тока никакого не будет, так как справа и слева одинаковое количество электронов. Такую кривую деформировать просто. Немного просто ее исказить: справа сделать больше, а слева

меньше или наоборот. После этого «потечет» электрический ток. Если же заполнить зону целиком, то малыми вариациями тут не обойтись. Поэтому, для того, чтобы потек ток, электроны нужно перемещать в следующую зону. Это потребует конечного и достаточно существенного вложения энергии. Таким образом, металлы в рамках зонной теории – это все вещества, у которых нечетное количество электронов на элементарную ячейку и те сложные кристаллы, у которых возможен переход электронов между зонами и такие зоны пересекаются. Диэлектрики – это материалы с четным числом электронов на элементарную ячейку, у которых часть зон полностью заполнена, а часть пустая.

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

Рассмотрим общие свойства движения электрона, у которого закон дисперсии отличается от привычного квадратичного. Пусть есть закон дисперсии $U(q)$. Вопрос: что это значит с точки зрения волнового «пакета»?

Вспомним, как этот волновой «пакет» дается. Нужно собрать волновую функцию в виде «пакета» из многих плоских волн.

$$\Psi(r) = \int dq \varphi_q(r) e^{iqr - \frac{(q-q_0)^2}{2\delta q^2}}$$

Данная волновая функция соответствует моменту времени равному 0. В нестациональном уравнении Шредингера у волновых функций есть дополнительный, зависящий от времени фазовый множитель.

$$\Psi_{t \neq 0}(r) = \int dq \varphi_q(r) e^{iqr - \frac{(q-q_0)^2}{2\delta q^2} - iE(q)\frac{t}{\hbar}}$$

Знаем, что δq^2 малая величина и волновой пакет достаточно хорошо локализован в пространстве квазиимпульсов. Поэтому можно разложить $E(q)$ вблизи $q = 0$ в ряд Тейлора, зная, что ничего, кроме малой окрестности $q = 0$, в волновую функцию не вносит.

$$E(q) = E(q_0) + \frac{\partial E}{\partial q}(q - q_0)$$

Кроме того, набивку $\varphi_q(r)$ тоже заменим на φ_{q_0} .

$$\Psi_{t \neq 0}(r) = \varphi_{q_0}(r) \int dq e^{i(q_0 \frac{r}{\hbar} - E(q_0)\frac{t}{\hbar})} e^{i(q-q_0)\frac{(r - \frac{\partial E}{\partial q}t)}{\hbar} - \frac{(q-q_0)^2}{2\delta q^2}}$$

Экспонента, как видим, не зависит q , поэтому ее можно вынести за знак интеграла. Это просто фазовый множитель, который не влияет на физику. Таким образом, временная динамика волнового пакета сводится, во-первых, к фазовому вращению, которое не важно. Во-вторых, к сдвигу, который имеет место быть со скоростью $\frac{\partial E}{\partial q}$. Наш волновой пакет перемещается в пространстве и его скорость перемещения определяется производной закона дисперсии по квазиимпульсу.

$$\frac{d}{dt} \langle r \rangle = \frac{\partial E}{\partial q}$$

Это обобщение – известная формула для скорости. Если

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

то

$$\frac{\partial E}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

получается привычная скорость. В присутствии внешней силы, импульс всегда меняется под воздействием этой силы.

$$\frac{d}{dt} \langle q \rangle = eE$$

Вернемся к закону дисперсии. В точках близких к 0 она выглядит, как парабола. Если увеличиваем квазиимпульс, то скорость растет. Но это происходит до тех пор, пока не приблизимся близко к границе зоны Бриллюэна. В ней частица опять начинает останавливаться. Увеличиваем дальше квазиимпульс. При достижении этой зоны, увеличивать некуда и происходит перескок на другую границу. Если двигаться дальше, то произойдет возврат через отрицательное значение скорости.

На самом деле, что значит увеличиваем импульс? Выше записали уравнение, которое описывает динамику импульса. Если приложить внешнюю силу, то частица, как привыкли считать, ускоряется и у нее увеличивается импульс. Но если идет речь о движении в периодическом потенциале, то картина меняется. Частица сначала, действительно, ускоряется. Увеличивая импульс, замедляется, останавливается в зоне Бриллюэна, движется обратно и возвращается в первоначальное положение. То есть получается совершенно другая картина. Подвергнутое действию внешней силы частица, находящаяся в периодическом потенциале совершает периодические движения в пространстве вместо того, чтобы разогнаться и улететь в бесконечность.

Такие осцилляции принято называть блоховскими. В твердых телах, кристаллах наблюдать их сложно. На гранях решетки электроны рассеиваются слишком часто, чтобы заметную часть пути проделать в реальном кристалле. Если посадить квантовый объект, например, атом, в искусственно созданный оптический потенциал, при этом их охладить до маленьких температур, чтобы тепловая энергия движения не мешала, и посмотреть как он движется во внешнем поле, созданном силой тяжести, то ровно эту картину удастся увидеть. Атом ускоряется, пока из-за брегговского отражения начинает останавливаться, потом летит в обратном направлении и при этом совершает тысячи подобных осцилляций.

Скорость, определяемая взятием производной от энергии по импульсу, называется групповой скоростью. Это скорость, с которой движется волновой пакет, скорость переноса массы и энергии системы. Она отличается от фазовой скорости, от скорости, с которой движется горб синуса, если у него вращается фаза. Если взять одну волну и посмотреть с какой скоростью движутся горбы в этой волне, то это будет не производная, а просто отношение энергии к импульсу. В произвольном случае производные совпадать не будут. Фазовая скорость особого физического смысла не имеет и наиболее яркое тому подтверждение: в некоторых системах фазовая скорость может превышать скорость света. В этом нет ничего странного и парадоксального. Поскольку фазовая скорость не соответствует переносу чего-либо материального или какой-то информации. Групповая скорость всегда меньше световой по теории относительности.

Полупроводники. Электроны и дырки. Эффективная масса

Вернемся к зонной теории. Имеется специальный класс диэлектриков соответствующий сравнительно небольшим ширинам запрещенной зоны. Они настолько небольшие, что часть носителей по причине конечной температуры или по причине специфики химического состава, так называемого допирования, могут оказываться в следующей зоне. Такие вещества называются полупроводниками. В них проводимость осуществляется за счет небольшого количества носителей, попавших в верхнюю зону. Традиционно в полупроводниках нижняя заполненная зона называется валентной или первая незаполненная зона проводимости. И наоборот, если по причине химического состава или допирования электронов, чуть меньше нужно, чтобы полностью заполнить валентную зону. Проводимость осуществляется за счет вакансий, которые называют дырками. Они находятся в верхней части валентной зоны.

Свойства электронов и дырок определяются тем, как устроен закон дисперсии вблизи, соответственно, над зоной проводимости или потолка валентной зоны. Потолком будет либо экстремум, значит зависимость $E(q)$ вблизи точки можно разло-

жить в ряд Тейлора. Первого члена нет, нулевой не нужен. Коэффициент при втором, если взять обратную от него величину, получится величина с размерностью массы. Ее принято называть эффективной массой и, действительно, электроны ведут себя, как частицы с эффективной массой, отличающейся, иногда на порядок, от массы свободного электрона. Раз $E(q)$ записывается, как парабола, но с другим коэффициентом равным массе электрона, значит эффективно это частица с определенной массой.

Квантовая электроника. Вынужденные переходы. Спонтанные переходы. Коэффициенты Эйнштейна

Рассмотрим квантовую электронику, а именно вопросы взаимодействия излучения и материи.

Эйнштейн первым рассмотрел задачу о взаимодействии атома с излучением, а конкретно с термодинамически-равновесным излучением. Рассмотрев эту задачу, ученый подтвердил догадку о свойствах испускания и поглощения света атомами. Пройдемся по этой теории.

Пусть есть атом, у которого есть основное состояние с энергией E_0 и еще одно состояние с энергией E_1 .



Рис. 10.6. Энергетические состояния E_0 и E_1

Эйнштейн рассматривал вопрос о скорости перехода, вероятности перехода в единицу времени с уровня E_1 на E_0 . Соответственно, если есть внешние фотоны с уровня E_0 на E_1 .

Согласно Эйнштейну, переходы с основного на возбужденный уровень идут в присутствии внешнего светового поля и вероятность такого перехода пропорциональна количеству фотонов нужной частоты.

$$\hbar\omega = E_1 - E_0$$

И скорость перехода из 0 в 1:

$$B_{0 \rightarrow 1} U(\omega) n_0$$

где $U(\omega)$ – плотность фотонов на частоте, n_0 – концентрация атомов в основном состоянии, $B_{0 \rightarrow 1}$ – коэффициент.

В современной терминологии идет речь о вынужденных переходах вверх. Вынужденные потому, что под воздействием внешнего света, а вверх - с 0 на 1 уровень.

Теперь рассмотрим наоборот из возбужденного состояния в основное. Во времена Эйнштейна полностью было ясно, что, фактически, это результат работы Бора. В возбужденном состоянии атом не живет вечно, даже в отсутствии каких-либо внешних причин. Он спонтанно, сам по себе, может перейти в состояние 0, испустив фотоны. Введем коэффициент A спонтанного деления, который определяет скорость переходов.

$$A_{1 \rightarrow 0} n_1$$

Эйнштейн предположил, что кроме спонтанных должны существовать и вынужденные переходы. Они происходят под действием фотона, пролетающего мимо атома. Тогда получаем:

$$A_{1 \rightarrow 0} n_1 + B_{1 \rightarrow 0} U(\omega) n_1$$

Вычислим коэффициенты. Обратимся к свойствам термодинамически равновесного фотонного газа. Для него $U(\omega)$ известно:

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

Если система находится в термодинамическом равновесии, то не только известны фотонные свойства, но и свойства населенности двух состояний. По распределению Гибса:

$$\frac{n_1}{n_0} = e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$$

Раз система в термодинамическом равновесии, то скорость перехода из основного в возбужденное состояние должна равняться скорости перехода из возбужденное в основное.

$$B_{0-1}U(\omega)n_0 = (A_{1-0} + B_{1-0}U(\omega))n_1$$

$$B_{0-1}\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} = (A_{1-0} + B_{1-0}\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1})e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$$

Это равенство должно выполняться при любом значении температуры. Рассмотрим сначала случай очень большой температуры. Тогда

$$e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \sim 1$$

И чем значение kT больше, тем второе слагаемое справа будет больше по сравнению с первым. Если температура очень большая, фотонов в системе очень много, спонтанными процессами можно пренебречь. В простейшем приближении забываем про A и при B справа и слева стоит одно и то же. Таким образом, в пределе большой температуры:

$$B_{1-0} = B_{0-1} = B$$

Преобразуем выражение:

$$A = B\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}\left(\frac{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} - \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}\right)$$

$$\frac{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} - \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} = 1$$

$$A = B\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}$$

Получили, что коэффициент связи не зависит от температуры. Коэффициент Эйнштейна – характеристика перехода, а не ансамбля. Таким образом, оказывается, что явление вынужденного и спонтанного излучения друг с другом связаны. Если переход может излучать спонтанно, значит он излучает и вынужденно и наоборот.

Лазеры

Можно задать вопрос: а возможно ли обеспечить ситуацию, когда система, с падающим на нее фотоном, будет не поглощать, а наоборот усиливать? Ответ: да. Нужно создать инверсию населенностей, сделать так, чтобы больше атомов находилось в возбужденном состоянии, чем в основном. Тогда с большей вероятностью падающий фотон, вместо того, чтобы поглотиться, переводя один их атомов в состояние возбужденное, наоборот будет один из таких возбужденных атомов ронять в основное состояние и рождать такой же с такой же частотой.

Этот вопрос не был изучен Эйнштейном. Только через несколько десятилетий соответствующие системы были реализованы. В результате были созданы лазеры.

В любом случае нельзя добиться того, чтобы $n_0 = n_1$. Температуру можно поднимать, делая n_0 близким к n_1 , но не более. Чтобы сделать n_1 больше, чем n_0 , нужно в термодинамическом случае сделать температуру отрицательной. Но с точки зрения термодинамики – это невозможно. Если же отойти от равновесия, то соответствующее условие создать можно. Большую часть лазеров используют в схемах, основанных на привлечении к рассмотрению третьего и выше уровней. Простейшими будет трехуровневая схема.



Рис. 10.7. Трехуровневая система

Выберем систему такую, у которой коэффициент Эйнштейна, соответствующий переходу из E_1 в E_0 будет маленьким.

$$A_{1-0} \ll A_{2-0}, A_{2-1}$$

Возьмем набор таких атомов. Подвергнем набор, например, сильному излучению, внешней накачке, то есть воспользуемся рядом лампой широкого спектра.

Раз переход E_1 в E_0 характеризуется маленьким коэффициентом, то первое и главное к чему приведет такое внешнее излучение – это система перейдет из основного состояния в возбужденное с E_2 . Из этого состояния система, конечно, может

либо спонтанно, либо вынужденно перейти в состояние E_0 , но может и перейти в состояние E_1 .

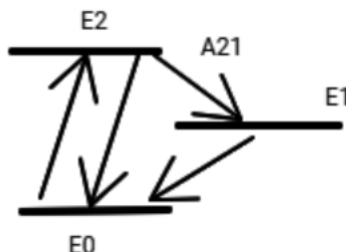


Рис. 10.8. Переходы в трехуровневой системе

Внешний свет задержит фотоны, соответствующие переходы между 0 и 2, но не между 2 и 1. Таким образом, вторые переходы будут спонтанные. Фотонов вынуждающихся перейти в систему обратно из 1 в 2 нет. Некоторые части атомов переходят из состояния 2 в 1 и в нем остаются достаточно долгое время. Переходов из 1 в 2 тоже не так много (смотри условие).

Если же достаточно долго и сильно светить светом, который перебрасывает из 0 в 2, это означает, что все атомы будут переходить в E_1 , в нем аккумулироваться и рано или поздно в системе возникнет инверсия населенностей.

Запустим внешний фотон. Пусть он будет один с частотой ω_{1-0} . Этот фотон скорее всего не поглотится, а будет усиливаться. В реальных лазерных схемах то, что называется активной средой – материал либо вещество, содержащее атомы, которые переводятся в инверсионную населенность, помещают между двумя зеркалами так, что фотоны с частотой ω_{1-0} между ними ходит, отражаясь от них, усиливаясь. Таким образом, возникает мощный, когерентный, то есть фиксированный по частоте или по направлению распространения, свет. Если одно из этих зеркал полупрозрачным, то лазерный луч выйдет за пределы резонатора.

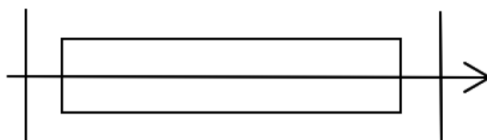


Рис. 10.9. Луч между двумя зеркалами

Источники лазерного света обладают массой достоинств: высока когерентность в

пространстве и времени, высокая мощность, управляемость. Существуют импульсные лазеры с импульсами, которые содержат всего несколько десятков периодов колебаний световой волны. В такой импульс загоняется достаточно большая энергия и мощность. Единственный ограничивающий фактор – это частота, на которой светит лазер. Это частота соответствующего электронного перехода. Это видимый свет, ближний инфракрасный ультрафиолета, можно дальше уйти в инфракрас, если задействовать молекулярные колебания. В ультрафиолете будет идти сложно, хотя это технологически важно.

Лазер на свободных электронах

Рассмотрим другой тип лазеров – лазеры на свободных электронах. Если электрон пролетает через область пространства, где есть магнитное поле, то он под действие силы Лоренца начинает поворачивать, как положено движущемуся ускоренному заряду и начинает излучать. Такое излучение достаточно длинноволновое и совершенно не когерентно не в смысле пространственного и спектрального характеристик. Однако, эти ограничения можно обойти. Первая особенность – достаточно длинноволновый характер излучения. Он меняется если электроны разогнать достаточно быстро, переведя в ультрарелятивистский режим. Тогда характерные частоты возрастают в γ^2 раз, где γ – релятивистский фактор. Сразу попадают для современных источников быстрых электронов в рентгеновскую область.

Рассмотри вопрос, связанный с когерентностью. Делают следующим образом:

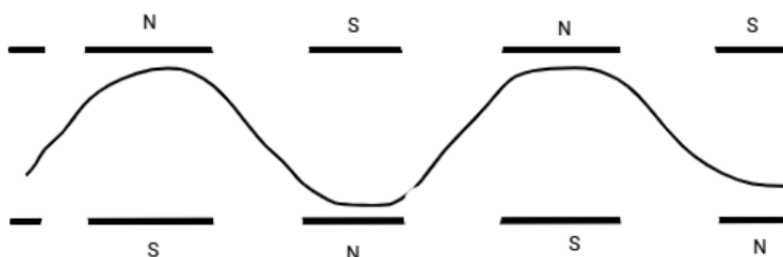


Рис. 10.10. Эксперимент с когерентностью

Это электронный пучок, который проходит через периодическую структуру, сделанную из магнитов с чередующейся полярностью. Таким образом, пучок будет двигаться по синусоиде. Эта ситуация оказывается близка к той, которая рассмотрена Эйнштейном. Фотоны могут излучаться движущимися ускоренными электронами не только сами по себе, но и под воздействием других фотонов аналогичной частоты. Таким образом, они выпускаются в начале, бегут с равными скоростями и на следующих периодах осцилляции испускаются вынужденно. На выходе имеем мощный,

направленный, в достаточной степени когерентный импульс рентгеновского диапазона. Его характеристика будет полностью управляема. Свойства определяются скоростью электронного пучка. Такие установки хороши всем, но есть ограничение – огромный размер.

Лекция 11. Распределение Ферми-Дирака. Квантовая запутанность. Классическая информация

Часть 1. Распределение Ферми-Дирака. Свойства электронов в металлах при конечной температуре

Рассмотрим распределение Ферми-Дирака и свойства металлов при конечной температуре.

Когда говорили про тождественные частицы, то рассматривали бозоны и статистику Бозе-Эйнштейна, частицы с целым спином, например, фотоны или атомы с целочисленными спинами. В них состояний с заданными квантовыми числами может быть сколько угодно. Была таблица со статистикой. Статистика бозонов от статистики классических частиц отличается. Тем не менее тех и других в одно состояние влезает произвольное количество. Знаем, что помимо бозонов существуют и другие квантовые объекты: частицы с полуцелым спином – фермионы. В соответствии с принципом Паули для фермионов: в заданное состояние вмещается не более одного. Не может быть в одном и том же квантовом состоянии двух тождественных фермионов.

Если есть такое жесткое ограничение, значит, и свойства статистики этих частиц совершенно будут другие, чем для бозонов. Можно записать статистическую сумму:

$$Z = \sum_j e^{-\frac{E_j}{kT}}$$

В данном случае фигурирует всего лишь два слагаемых. Первое – отсутствие частицы в заданном состоянии, второе – учет химического потенциала.

$$Z = 1 + e^{-\frac{E-\mu}{kT}}$$

Пусть есть одно состояние, где есть одна частица или их нет. Она обменивается частицей с неким резервуаром. Поэтому, когда частица попадает в заданное состояние, не только надо учесть, что она приобретает заданную энергию, но и вырвать ее из резервуара тоже нужно.

В случае бозонов ряд был бесконечный, нужно было суммировать геометрическую прогрессию. В результате экспонента попадала в знаменатель.

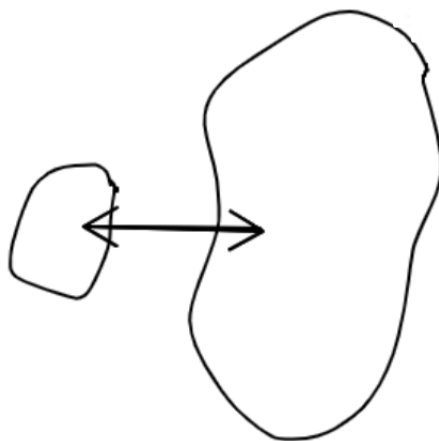


Рис. 11.1. Обмен частицы с резервуаром

Вычислим среднее число заполнения. Воспользуемся тем, что состояний всего два.

$$\langle n \rangle = \sum_j p_j n_j = \frac{1}{z} (1 * 0 + e^{-\frac{E-\mu}{kT}} * 1)$$
$$\langle n_f \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}$$

Получили формулу для среднего количества частиц, когда имеем дело с фермионами.

Вспомним формулу для среднего количества частиц для бозонов:

$$\langle n_B \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1}$$

Для статистики Больцмана (классические частицы):

$$\langle n_{cl} \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}}}$$

Видно, что квантовые формулы переходят в классический предел, если экспонента на много больше 1. Если расстояние $E - \mu$ в единицах kT достаточно велико. Это тоже самое, что предел разреженного числа частиц, если 1 можно пренебречь, то экспонента большая, то значение среднего количества частиц будет мало.

Физически же: если газ частиц разреженный, то в любом случае будут редки ситуации, когда две частицы пытаются находиться в одном состоянии. Поэтому эффекты квантовой статистики стираются.

Если число частиц больше или порядка единицы, то в бозонном случае Ферми разница будет большой. В бозонном случае, чисто математически, требование $\langle n_B \rangle > 0$ сразу означает, что любой одночастичный уровень в системе должен находиться не ниже, чем величина химического потенциала. Когда есть точное равенство, которое соответствует конденсации Бозе-Эйнштейна (макроскопический барьер), то есть большое число частиц на самом низком уровне, который есть в системе. Если же Бозе-Эйнштейновской конденсации нет, то химический потенциал меньше, чем любой уровень энергии для одной частицы. В классическом и фермионном случае такого требования нет. Формально, химический потенциал может быть любым и фактически так все и оказывается. Например, в металлах химический потенциал определяет границу между состояниями, которые при низких температурах заполнены, и состояниями, которые при низких температурах пустые.

Рассмотрим такой случай более внимательно для фермионов.

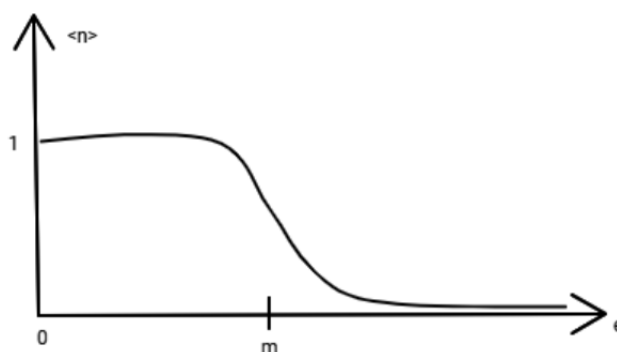


Рис. 11.2. Случай для фермионов

Для изображения кривой следует изобразить несколько характерных точек. Первой будет

$$E = \mu : \langle n_f \rangle = \frac{1}{2}$$

Если

$$E \gg \mu : \langle n_f \rangle \rightarrow 0$$

$$E \ll \mu : \langle n_f \rangle \approx 1$$

Если внимательно посмотреть на статистику Ферми-Дирака, то можно заметить, что получившаяся кривая симметрична относительно точки, соответствующей химическому потенциалу. Можно понять, что характерный масштаб, на котором $\langle n_f \rangle$ существенно отличается от 0 и 1. В физике говорят о масштабе размытия этой Ферми-ступеньки и он будет порядка kT .

Ранее обсуждалось, как устроены металлы при нуле температуры. Меньше энергии Ферми все состояния заняты, а выше – все состояния свободны. При конечной температуре это утверждение обобщается следующим образом, как изображено выше.

Если говорить про металлы, которые встречаем в обычной жизни, величина размытия не очень велика, потому что характерные значения энергии электронов, в частности значения химического потенциала, совпадающего с энергией Ферми при нуле температуры, это электрон-вольты. Знаем, что kT при комнатной температуре – 0,03 эВ. Условно говоря, разница на одну сотую от электронного масштаба энергий, конечная температура размывает фермийскую ступеньку. Такое размытие существенно во многих эффектах физически наблюдаемых. Например, вклад в теплоемкость металла дают электроны.

О теплоемкости решетки говорили ранее. Это формула Дебая. Из-за вымораживания высоко лежащих степеней свободы теплоемкость меняется от константы при высоких температурах до величины пропорциональной T^3 при температурах на много меньше температуры Дебая.

Теперь рассмотрим случай для электронов. Будем отсчитывать энергию системы от состояния системы, в котором она находится при нуле температуры. Это состояние с наименьшей энергией, когда ниже уровня Ферми все заполнено, а выше – все пусто.

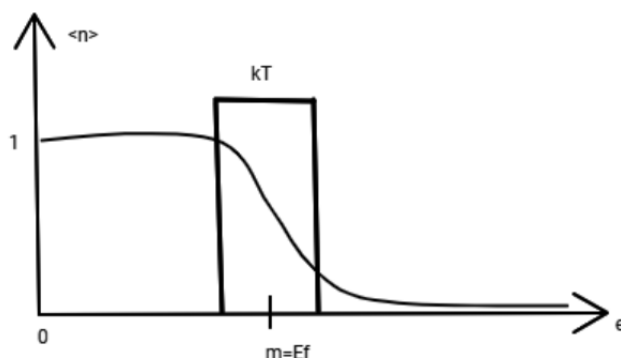


Рис. 11.3. Уровень Ферми

Запишем энергию системы:

$$\langle E \rangle = \sum_p (\langle n \rangle_p - \langle n \rangle_{p, kT=0}) (E_p - E_f) =$$

В одномерном случае в первой зоне Бриллюэна выполняется закон дисперсии:

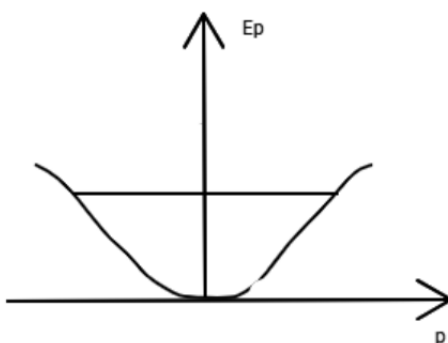


Рис. 11.4. Закон дисперсии в зоне Бриллюэна

Это простейший случай, когда появляется металлическая проводимость. Один электрон на атом. До середины заполнена первая зона Бриллюэна. При этом существует конечная температура при E_f , которая размывает фермийскую ступеньку.

Вклад в сумму дают только состояния вблизи энергии Ферми. Это происходит потому, что вычитаем из плавной кривой эту ступеньку, поэтому разница между ними будет отлична от нуля только там, где распределение будет размыто. Тогда, фактически, энергия будет состоять из двух одинаковых половинок. Первая – то, что выше энергии Ферми, вторая – то, что ниже энергии Ферми. Будем учитывать то, что находится только выше энергии Ферми.

$$\begin{aligned} \langle n \rangle_{p, kT=0} &= 0 \\ E_p &> E_f \\ &= 2 \sum_p \frac{E_p - E_f}{e^{\frac{E_p - E_f}{kT}} + 1} = \end{aligned}$$

Переходит от суммы к интегрированию. При этом нужно также перейти от импульсов к энергиям, вспомнив понятие плотности состояний. Это количество в определенном диапазоне энергии, которое в системе есть. Плотность состояний вблизи поверхности Ферми – это, примерно, константа, так как интересуется малая область.

$$\begin{aligned} E_p &> 0 \\ &= 3L^3 \int \frac{A(E_p)(E_p - E_f)}{e^{\frac{E_p - E_f}{kT}} + 1} dE_p = \end{aligned}$$

Введем обозначение:

$$x = \frac{E_p - E_f}{kT}$$

$$= 2L^3 A(E_F) (kT)^2 \int \frac{x dx}{e^x + 1}$$

Важна в данном случае зависимость энергии от температуры. Она пропорциональна $(kT)^2$. Физически ясно откуда это взялось. Величина слоя, на которой размыто распределение – это kT и характерная энергия частиц в этой области – kT .

Запишем теплоемкость:

$$C = \frac{d \langle E \rangle}{dT} \sim T$$

Получаем, что теплоемкость электронного подсистемы зависит линейно от температуры. Вспомним, что в случае фононов имеем линейный закон дисперсии вблизи нуля и вклад дает только область с малыми энергиями вблизи нуля. Вся область сжимается, которая дает теплоемкость.

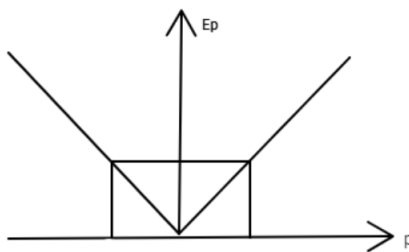


Рис. 11.5. Сжатие области

В случае же электронов есть поверхность Ферми. Ее размер и площадь от температуры не зависят. Поэтому вклад в энергию системы и теплоемкость дает большее количество электронов. Толщина уменьшается, но хотя бы площадь не будет меняться.

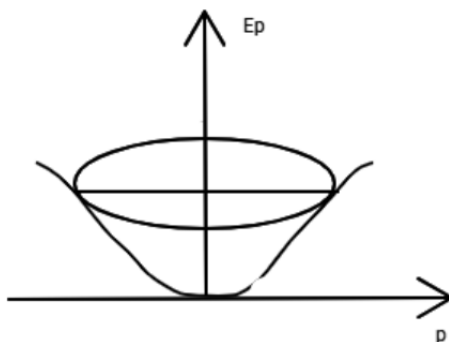


Рис. 11.6. Уменьшение толщины

Таким образом, при низких температурах у металлов электронная теплоемкость спадает с уменьшением температуры заметно медленнее, чем решеточная. Фактически,

при температурах много ниже Дебаевской электронная теплоемкость внесит подавляющий вклад. Но при комнатной температуре она мала.

Отступление от программы: что происходит в металле на самом деле (о взаимодействии электронов)

Рассмотрели, как при конечных температурах размывается спектр электронной подсистемы вблизи температуры Ферми. Также заметили, что «есть жизнь» вблизи поверхности электронов Ферми в слое толщиной порядка kT . Теперь рассмотрим, что происходит в металлах на самом деле. Ранее складывалась ошибочная картина, что электроны в металле не взаимодействуют друг с другом. Существует частный случай – Ферми газ. У электронов есть кинетическое движение и закон дисперсии, но при этом забывается взаимодействие электронов.

Знаем, что электроны заряжены, они отталкиваются кулоновскими силами. И не ясно, почему кулоновским взаимодействием пренебрегаем. Если взять из справочника данные по плотности электронов в металлах, найти характерное расстояние между электронами, посчитать характерное значение кулоновской энергии отталкивания и сравнить ее с энергией Ферми, то быстро выяснится, что это величины одного порядка. В зависимости с каким металлом работать, она может быть отличаться, но порядок будет один.

Возникает вопрос: почему тогда происходит пренебрежение величинами? Ответ на вопрос физики начали находить в 30-40х годах. Первой теорией, которая не забывает о том, что в реальном мире фермионы друг с другом взаимодействуют, это теория ферми-жидкости Ландау.

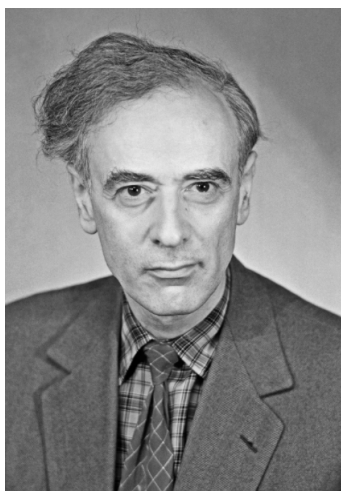


Рис. 11.7. Ландау Лев Давидович, советский физик-теоретик

Она была развита для описания жидкого гелия. Конечно, взаимодействие между электронами существенная и им пренебречь нельзя. Основное состояние в металлах, состояние с наименьшей энергией сильно отличается по своей внутренней структуре от основного состояния ферми-газа. Но экспериментатору не важно, как устроено основное состояние. Ему важно, как устроен отклик металла, проводимость, оптические свойства, то есть важно, как выглядят возбуждения системы, близкие к основному состоянию. Ранее обсуждали возбуждение, перешедшие из конечной температуры в области за пределами поверхности Ферми электроны. Оказывается, что даже если между электронами есть существенное взаимодействие, общая картина возбуждений вблизи основного состояния будет выглядеть примерно также, как для бозонов. Это некие эффективные, квазичастицы, которые обладают определенным квазиимпульсом, являются фермионами, которые как раз и называют электронами в металле. То есть свойства возбуждения над основным состоянием такие же, как у ферми-газа.

Существует теорема Латтинжера, которая говорит, что, если включить взаимодействие между электронами и пока оно не очень большое, объем внутри поверхности Ферми будет оставаться неизменным, таким же, как в случае, если взаимодействия нет.

Таким образом, для реальной системы с взаимодействиями между частицами можно применять на количественном и формульном уровне многие выводы, которые сделаны и без взаимодействия. В частности, главный кардинальный вывод о том, как устроена система при температурах конечных, но много меньше температуры Ферми. То есть есть возбуждение вблизи поверхности Ферми.

Рассмотрим вопрос: какие константы определяют свойства нашего мира? Ответ: свойства нашего мира определяются константами, входящими в стандартную модель. Но туда входят константы достаточно большие. Это по размерности МэВ или ГэВ, если говорить об энергии. Очень короткие времена. Кажется, что когда строим физическую теорию, свойства решения ее с точки зрения теории размерностей должны описываться качественно тем набором масштабов, которую теория дает. Значит, характерные масштабы нашего мира по теории – это МэВ или ГэВ. Но существование всего при электрон-вольтах ниже комнатной температуры (0,03 эВ). При этом значении и ниже существуют атомы, решеточные колебания, еще ниже сверхпроводимость и т.д. Не происходит полного вымораживания жизни и степеней свободы. Ответа на это утверждение физика не знает. Но отчасти, говоря про взаимодействующие фермионы, спектр ответов коснулись. Говорили про систему фермионов, возможно, со взаимодействием, у которого характерный масштаб энергии большой, но на малой энергетической шкале порядка комнатной температуры и ниже у системы остаются степени свободы и возможность для нетривиальной динамики. Если же говорить немного формально, то в спектре системы присутствуют частоты много меньше, чем

характерные масштабы исходной модели. Это происходит потому, что есть понятие о квазичастицах, есть представление, как устроен низкоэнергетический спектр, теорема Латтинжера. Эта совокупность знаний позволяет утверждать, что при низком масштабе энергии, по сравнению с масштабом исходной модели наблюдается интересная физика и жизнь есть.

Часть 2. Квантовая запутанность. Классическая информация

Вспомним, что такое классическая информация. Она измеряется в битах. Какой тогда смысл этого утверждения? Во-первых, то, что является не совсем тривиальным, что источник информации моделируется случайной величиной. Это происходит потому, что осмысленные источники информации, с которыми сталкиваемся в повседневной жизни, выглядят не случайно. Если же рассмотреть вопрос шире, то определение легко понять.

Рассмотрим простейший источник информации: монетка. Когда ее подбрасываешь, она падает либо орлом, либо решкой. В зависимости от этого можно присвоить случайной величине либо значение 0, либо 1. Значение единица монетка при каждом подбрасывании дает один вид информации. Считаем, что событие выпадения решки случайно, потому что, если знаю начальные условия, могу полностью просчитать траекторию этой монетки, в принципе, по закону классической динамики. Это не такая сложная система, а особенно, если бросать монетку, то можно сделать так, чтобы все время выпадал орел или решка.

Если можно решить динамические уравнения, зная начальные условия, и определить состояние этой монетки в любой момент времени, то можно предсказать исход и сам факт получения этого исхода. Но это никакой информации не принесет, кроме того, что уже было заложено в начальных условиях.

Поэтому настоящий источник информации, который принес бы новые знания о мире, которого нет, но должен казаться абсолютно случайным. Откуда-то случайность возникает в классической механике. Он берется из-за неточного знания начальных условий. Если взять динамическую систему, то достаточно сложно, чем случай с монеткой или с большим числом степеней свободы. Неточное знание начальных условий приведет к тому, что не сможем точно предсказать динамику системы, например, понять динамический хаос, в котором динамическая система ведет себя сильно поразному в зависимости от начальных условий. Если менять начальные условия, то не все, конечно, состояние меняется в некоем смысле на экспоненциальную большую величину. И поэтому можно рассчитывать динамику на какое-то время, а дальше она будет выглядеть, как нечто абсолютно случайное.

Это не фундаментальное ограничение. То есть, это всего лишь рассмотрение возможности точно узнать начальные условия и точно их прочесть. В квантовой механике есть вещи истинно случайные и, в каком смысле, эта наука истинная и чем отличается от классической.

Чтобы закончить рассмотрение вопроса об информации классической системы, давайте поймем, что характеризует количество информации, которое возникает при одном подбрасывании.

Рассмотрим наиболее общую модель. Пусть есть некий источник информации, который моделируем последовательностью независимых и одинаково распределенных случайных величин.

$$X_1, X_2, \dots, X_n, \dots$$

Естественно, источник, который выдает символ из некоторого ряда. Эти символы независят друг от друга и распределены случайно с неким распределением (вероятностью).

$$p_1, p_2, \dots, p_n$$

Дискретное число исходов показывает каждый исход, а значит соответствует вероятности, дискретному распределению. Значит, количество информации, которое в таком источнике содержится, характеризуется величиной, которую будем называть функцией Шеннона.

$$H = - \sum_j p_j \log_2 p_j$$

Значит, получили сумму по всем возможным исходам. Такое произведение означает вероятность исхода на логарифм с основанием два. Но чтобы получившаяся величина еще не была положительной, нужно поставить знак минус, потому что все вероятности в произведении, естественно, меньше единицы.

Функция Шеннона – это математическое выражение того, что информация измеряется в мире в битах и сопоставляется с каким-то другим числом. Но мерили бы ее в тритах или в чем-то еще, было бы все по-другому. Значит, давайте посмотрим, как устроена функция для простейшего случая.

Рассмотрим, бинарный источник. Пусть у нас есть всего два события.

p — орел
 $1 - p$ — решка

Запишем, как устроена функция Шеннона:

$$H = -p \log p - (1 - p) \log(1 - p)$$

Построим эту функцию:

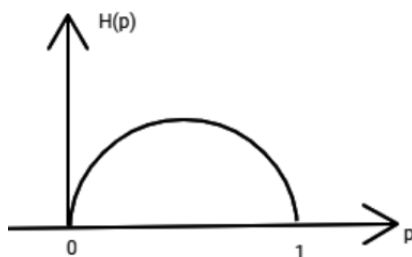


Рис. 11.8. Функция Шеннона

Значит, можно спокойно построить эту функцию. Заметим, что пересечение с осью ординат происходит в точках ноль и единица, а максимум она достигает при значении вероятности $\frac{1}{2}$. В принципе, это следовало ожидать. Значит, видим, что наши случайные величины максимально, когда мы имеем дело с хорошим экспериментом, например с монеткой, который ровно в 50 % случаев выпадает орлом и ровно в 50 % случаях — решкой. Теперь, в каком-то смысле, это мера информации.

Если у нас есть источник, который выдает случайные и распределенные величины. Существует утверждение, которое утверждает, что количество, то есть сколько понадобится бит, предположим, что хотим взять источник, с его помощью получить последовательности нулей и единиц и на вопрос: сколько бит на символ понадобится в среднем, чтобы закодировать эти сообщения, получим ответ: понадобится ровно

$$H(X) \text{ бит/символ}$$

Функции одинаковые и не коррелированы между собой. Собственно, это утверждение выражает тот факт, что мерой количества информации, содержащейся в сообщении является энтропия Шеннона. Это довольно разумно, потому что мы видим, что чем больше случайности, в некотором смысле, нашей последовательности символов из алфавита, тем больше энтропия, тем больше новой информации она

в себе. Если просто все это есть, то она состоит из единиц и не несет никакой информации, потому что точно знаем, что все последующие силы будут такими же как предыдущие и при этом энтропии будут равны нулю. Максимально случайная последовательность дает максимум информации.

Что из себя представляет бит физически? С математической точки зрения, это просто множество из двух чисел: ноль и единица. Физически же, это должна быть какая-то система, которая имеет два различных состояния. Например, это может быть монетка, которая лежит орлом или решкой. Это может быть, например, разные уровни напряжения на каком логическом элементе в компьютере или может быть наличие или отсутствие импульса света в оптическом волокне. Главное, что эти два состояния мы должны хорошо уметь отличать. То есть, однозначно, в измерении должны сказать где нолик получили, а где единичку.

Область квантовой теории

Значит, что будет, если попробуем это рассмотрение перенести в область квантовой теории. Если система квантовая, то все несколько усложняется. Как понимать, что будет аналогом бита в квантовой механике? Это элементарная двухуровневая система. Это система, в которой пространство состояний имеет базис из двух векторов:

$$|0\rangle, |1\rangle - \text{кубит}$$

Что это может быть? Это может быть двухуровневая там, где 0 и 1 соответствуют различным уровням энергии. Это может быть поляризация фотона, например, где ноль, скажем, условно-горизонтальная, а единица – условно-вертикальная поляризация или право-, левоциркулярная, соответственно. Это может быть проекция спина на какую-нибудь ось, если возьмем частицу со спином $\frac{1}{2}$, это у него проекция спина на ось Z, например, может принимать ровно два значения: $\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$. Тогда, значит, одному присваиваем значение 0, а второму – 1, получаем физическую реализацию кубита или квантового бита. Принято такое наименование и будем называть этот базис – кубит.

Произвольное состояние кубита, в силу в принципа суперпозиции:

$$|\Psi\rangle = C_1|0\rangle + C_2|1\rangle$$

где C_1 и C_2 произвольные комплексные числа, которые должны удовлетворять условию нормировки:

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$$

В остальном они совершенно производные. Что понять ситуацию, введем параметризацию на этом множестве:

$$|\Psi\rangle = \left(\cos\frac{\Theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\Theta}{2}|1\rangle\right)e^{i\gamma}$$

где γ – общая фаза, которую определить из экспериментов нельзя, а значит про нее можно забыть. Поэтому остается два действительных параметра Θ и φ , которые можно естественным образом отождествить с полярными азимутальными углами на сфере. Когда для классического бита было всего две точки:



Рис. 11.9. Классический бит

Поэтому получаем пространственное состояние кубита – сфера:

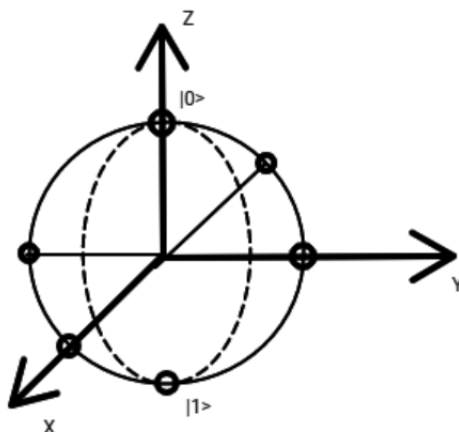


Рис. 11.10. Пространственное состояние кубита

Рассмотрим, как устроена сфера. Есть состояние ноль, которому соответствует верхняя точка, в котором полярный угол Θ равен нулю. Значит полярный угол Θ и азимутальный φ известны, то это противоположная точка. Вот это состояние соответствует единичке. Диаметрально противоположные состояния являются ортогональными. Теперь, например, точка пересечения с осью X, это $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, а в диаметрально противоположной точке – $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$. Соответственно, две точки (ось

Y и диаметрально противоположная) соответствуют суперпозиции $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle)$ и $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle)$.

Значит, геометрически пространство состояний гораздо богаче. Далее посмотрим, что можно выжать из увеличения этого пространства состояний по сравнению с классическим битом.

Преобразования кубита

Рассмотрим, как устроено преобразование кубита. В бите, как знаем, доступно только два преобразования, поэтому можно с битом ничего не делать, а можно сделать с ним логическое «не». Оно может перевести ноль в единичку, и наоборот. Больше никаких осмысленных преобразований с ним не будет. Существуют еще такие выраженные преобразования, которые один и ноль переводят, например, в ноль или единицу, но они не очень интересны. Получили, что с кубитом существует гораздо больше вариантов и наборов вращений. Есть унитарные операторы, которые зависят от угла α :

$$\hat{U}(\alpha) = e^{i\frac{\alpha}{2}\vec{n}\vec{\sigma}}$$

$$\vec{n} = n_x, n_y, n_z$$

$$\vec{\sigma} = \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$$

Матрице Паули соответствует оператор проекции спина $\frac{1}{2}$ на соответствующие оси: X, Y, Z . А $i\frac{\alpha}{2}\vec{n}\vec{\sigma}$ соответственно, оператору вращений. Это значит, $\vec{n}$ – единичный вектор, это орт оси, вокруг которой осуществляется поворот, а α – это угол, на который осуществляется поворот.

Тогда $\hat{U}(\alpha)$ – унитарный оператор. Унитарный оператор – это значит, что он сохраняет норму векторов. Поэтому, если берем какой-то вектор в гильбертовом пространстве, действуем на него этим оператором, то получаем вектор с единичной нормой, но каким-то образом повернутый вокруг оси $\vec{n}$ на угол α . Таким образом можно любое преобразование параметризовать.

Все логические операции над ним кубитом – это вида $\hat{U}(\alpha)$ унитарный оператор. Значит, например, логическое «не», можно реализовать двумя способами. На самом деле большим количеством способов, но остановимся на двух. Если хотим ноль переместить в единичку или единичку в ноль, то это будет соответствовать оператору поворота, у которого ось, например, совпадает осью X , а угол поворота – это π . Значит, если посмотреть на формулу выше:

$$\vec{n} = 1, 0, 0$$

$$\alpha = \pi$$

$$\hat{U}(\alpha) = \hat{\sigma}_x$$

Сама по себе матрица Паули σ_x осуществляет операцию логическое «не».

Пространство состояний. Теорема Холево

Теперь вернемся к тому, что расширили сильно пространственное состояние кубита. Получается, что вместо одного бита получили два действительных числа. Состояние кубита задается двумя действительными числами Θ и φ , а значит, каждый из них – это бесконечная двоичная дробь. А если захотим записать ее в виде последовательности битов, то она просто будет бесконечная.

В реальности никогда не сможем приготовить свой кубит на столько идеально, чтобы знаков после запятой там было бесконечно. Если же готовить его с какой-то неопределенностью в состоянии 1, то этими двумя числами будет кодироваться очень большое количество информации. То есть можем в свой кубит «впихнуть» огромное количество информации.

Первая идея, которая приходит в голову, если буду использовать для передачи информации вот эти кубиты, то значит, что смогу сделать какое-то очень плотное кодирование, то есть смогу «впихнуть» в каждый кубит огромное количество информации, «послать» его по каналу связи и оттуда ее потом извлечь. Это было бы замечательно, но, к сожалению, это не так в реальности.

Существует теорема, которая доказана была еще в 70х годах нашим соотечественником, математиком Холево.

Он доказал, что, если будете передавать информацию по квантовому каналу связи, то есть кодировать ее сначала в битах, потом передавать и потом декодировать обратно, то, к сожалению, вы не сможете передать больше, чем один бит на один кубит информации. То есть, несмотря на кажущееся многообразие состояний, «впихнуть» туда больше одного бита не получается. Почему? Строгое доказательство этой теоремы выходит за рамки курса, но попробуем проиллюстрировать его.

Значит, причина, конечно же, в том, что происходит при измерении. Закодировать можете что угодно. То есть сначала готовите кубит в произвольном состоянии, описываемом любой парой углов Θ и φ , а вот с измерением возникнет проблема. Дело в том, что неортогональное состояние неразличимо. Пусть есть пара состояний

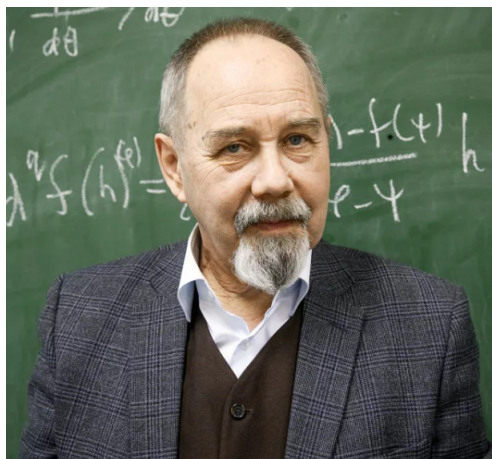


Рис. 11.11. Александр Семёнович Холево, советский и российский математик, специалист в области математических проблем квантовой информатики



Рис. 11.12. Пара состояний на плоскости

на плоскости:

Измерение в квантовой теории – простейшее измерение, проектор. То есть это прибор, что предположим для простоты. Пусть есть конкретная реализация кубита и пусть это, скажем, фотон, соответственно, нолик и единичка соответствуют двум ортогональным состояниям поляризации.

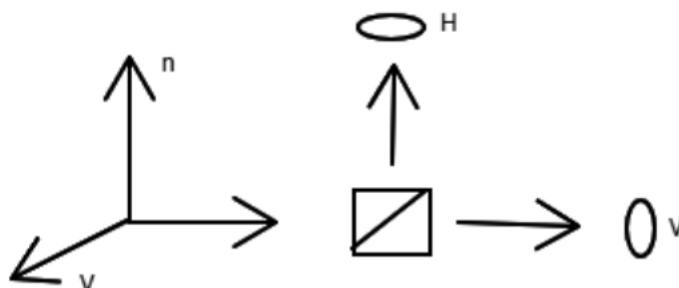


Рис. 11.13. Определение фотона

Как провести измерение? Ставим поляризационный светоделитель, то есть некую поляризационную призму, которая свет, поляризованный горизонтально, отражает, а свет, поляризованный вертикально, пропускает. Ставим счетчик фотонов – какой-нибудь фотоэлектронный умножитель (ФЭУ), который выдает импульс тока, если на него пришел фотон.

Пусть детектор идеальный, то есть, как только на него приходит фотон, он сразу же дает клик. Если увидели клик в V , то заключаем, что фотон был в состоянии V , для которого будет соответствие логическому нулю:

$$|V\rangle = |0\rangle$$

А если кликает детектор с H , то будет состояние:

$$|H\rangle = |1\rangle$$

А вот что будет, если посылаете на вход этой системы фотон, который поляризован под 45 градусов, который находится в таком состоянии:

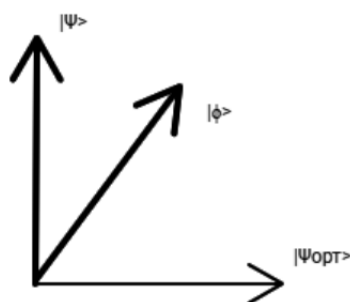


Рис. 11.14. Фотон, поляризованный под 45 градусов

Эта суперпозиция соответствует фотону, который просто поляризуется линейно под 45 градусов. Понятно, что это будет значить. С вероятностью $\frac{1}{2}$ будет кликать один детектор, и с вероятностью $\frac{1}{2}$ будет кликать другой детектор. Соответственно, по исходу однократного измерения, ничего нельзя сказать о поляризации. То есть, если кликнул один детектор, то нельзя сделать никакого вывода о том, как был поляризован этот фотон. Например, нельзя сказать, был ли он поляризован горизонтально или просто реализовалась одна из тех возможностей для диагональной поляризации, которая здесь была заложена. Значит точно различить по конкретному исходу и сказать какое состояние было возможно только для ортогональных состояний нельзя. Но это реализуемо для тех, у которых точки на сфере плохо находятся в диаметрально-противоположных точках, значит в нашей двумерной картине:

Для Ψ и $\Psi_{орт}$ всегда можно по щелчку детектора отличить какое состояние было на входе. Если же есть некая суперпозиция этих ортогональных состояний, то, конечно,

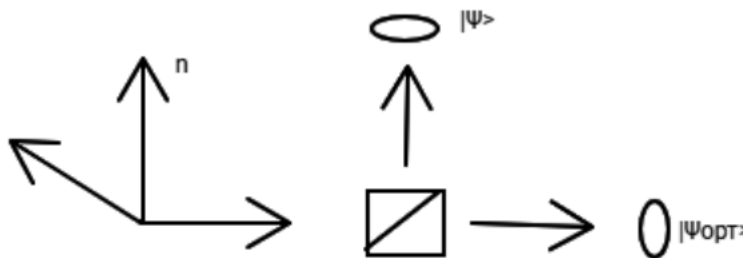


Рис. 11.15. Регистрация ортогональности

можно устроить схему так, чтобы всегда их можно было бы отличить, но при этом всегда будут ошибки.

Самое лучшее, что можно сделать, предположить, что есть по два состояния Ψ и ϕ . Хочется их отличать. Что можно устроить? Можно измерить на схеме так, чтобы она назначала Ψ в точности и $\Psi_{\text{орт}}$, тогда, если рассмотреть детектор и если произошел щелчок в детекторе ϕ , то можно с уверенностью утверждать, что исходное состояние было ϕ . Потому что Ψ и $\Psi_{\text{орт}}$ не могли дать на него щелчок, так как проекция его на это состояние равна 0.

Но если же произошел щелчок в детекторе Ψ , то ничего нельзя сказать, то есть было состояние Ψ или ϕ , и поэтому измерительная схема будет в лучшем случае говорить, что она, в лучшем случае, будет за позволять отличить Ψ от ϕ , но часть исходов не будет информативна. Нельзя сказать, какое состояние было, собственно, вот именно это мешает «запихнуть» в один кубит больше одного бита информации.

Понятно что происходит, то есть один бит закодируется очень просто. Кодируете в ортогональном состоянии противоположными точкам на сфере. А как только от них отклоняетесь в процедуре измерения на приемной стороне и когда попробуем декодировать эту информацию, будут возникать ошибки. Природа устроена так, что уровень этих ошибок будет тем больше, чем больше вес второго неортогонального состояния. В итоге, баланс сойдется в точности к тому, что у вас получается ровно один бит информации на кубит какой бы хитрой схемой кодирования не пользовались.

Смысл квантовой информации. Теорема о запрете клонирования

Существуют преимущества и недостатки в этой квантовой информации. Например, квантовую информацию нельзя копировать. Если, грубо говоря, сообщения за-

писаны в последовательности классических бит, можете спокойно взять и скопировать, можете просто измерить состояние вашей физической системы, которое является носителем бита и растиражировать его на сколь угодно количество копий. Никаких проблем. Оказывается, что в квантовом случае это не так.

Существует теорема, которая впервые появилась в литературе, наверное, где-то в 80х годах. До нее мог додуматься любой сразу после формулировки математических основ квантовой теории, но тем не менее появился она совсем недавно. Она называется «о запрете копирования» = «No-cloning».

Суть в чем: невозможно создать некое универсальное устройство, которому на вход подается неизвестное квантовое состояние, а на выходе получается две копии этого неизвестного квантового состояния.

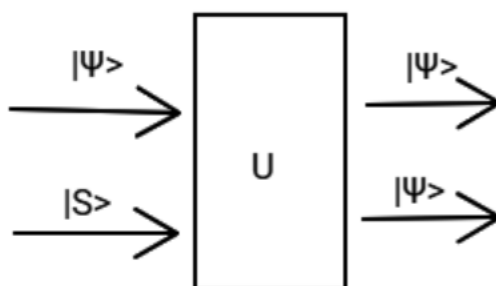


Рис. 11.16. Задача о запрете кодирования

Любая квантовая механическая эволюция должна описываться унитарным оператором. Почему? Потому что норма вектора должна сохраняться при эволюции. Если хотите, этот унитарный оператор – это экспонента от гамильтониана, которая описывает эту эволюцию.

Предположим, что есть идеальный оператор, как квантовая копировальная машина. У нее есть входное состояние Ψ и какое-нибудь состояние S . Это, грубо говоря, то, на что хотим скопировать состояние. Поскольку оператор унитарный, обязательно должно быть два входа и два выхода, не может быть один вход и два выхода. На выходе машина должна выдать Ψ и Ψ , она не должна испортить исходное состояние и должна создать его точную копию.

Запишем, что делает эта машина:

$$|\Psi\rangle |S\rangle \rightarrow |\Psi\rangle |\Psi\rangle = U(|\Psi\rangle |S\rangle)$$

Для другого состояния:

$$|\varphi\rangle|S\rangle \rightarrow |\varphi\rangle|\varphi\rangle = U(|\varphi\rangle|S\rangle)$$

Домножим каждое из равенств скалярно:

$$\begin{aligned}\langle\Psi|\varphi\rangle\langle S|S\rangle &= \langle\Psi|\varphi\rangle^2 \\ \langle S|S\rangle &= 1 \\ \langle\Psi|\varphi\rangle &= \langle\Psi|\varphi\rangle^2\end{aligned}$$

Это может выполняться только в двух случаях: если они совпадают или они ортогональны.

$$\langle\Psi|\varphi\rangle = 0 \text{ или } 1$$

К какому выводу приходим: копировальная машина может копировать опять и только ортогональное состояние, потому что для любых других получим противоречия.

Если взять Ψ не ортогональное φ и такое, что скалярное произведение будет каким угодно числом между нулем и единицей, то вот из этого рассуждения придем просто к противоречию. Получится, это уравнение не выполняется, а это значит, что не существует такого унитарного оператора, такой унитарной копировальной машины, которая может получить на вход один кубит и выдать на выходе два в одинаковом состоянии.

К чему это приводит? Это приводит к тому, что единственной стратегией может быть измерять это состояние и потом готовить новую по той информации, которую имеем. На измерение, опять-таки, есть ограничение, накладывающееся тем, что неортогональное состояние неразлично. Значит, оказывается, что это можно использовать во благо.

Квантовая криптография

Собственно, на этом принципе основана самая, наверное, развитая область науки о квантовой информации, которая, по крайней мере, практически единственная получила реальное применение в жизни, – это квантовая криптография. Какая интуиция стоит за квантовой криптографией? Интуиция такая: теорема о запрете копирования

запрещает подключиться к квантовому каналу связи и копировать оттуда информацию. Нельзя этого сделать. Единственное, что можно делать – поставить туда измерительное устройство, которое будет выдавать результаты измерения, то есть уже информацию классическую и возможно по показаниям этого измерительного устройства пытаться как-то судить о квантовом состоянии. Но измерения с неизбежностью квантовое состояние портит.

Например, если вернемся вот к ситуации с детекторами. Вот измерительное устройство, предположим, получили клик в одном детекторе и заключили, что значит состояние – это фотон поляризованный горизонтально. Значит, пусть я злоумышленник, который хочет перехватить сообщение, кодируемое этой поляризацией фотонов.

Что можно сделать? Можно просто взять приготовить фотон поляризованный горизонтально, поскольку думаю, что он поляризован горизонтально и послать его дальше, но если как легитимный пользователь, который должен был получить это сообщение, знает, что фотон должен был быть поляризован определенным образом, то он может повернуть базис, в котором делает измерение, то есть повернуть вот этот поляризационный элемент на 45 градусов. Тогда, он должен был бы с достоверностью получить щелчок в одном из каналов. При наличии подслушателя, который послал горизонтально поляризованный фотон, если мы разложим его в базисе плюс-минус 45 градусов, то есть:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle) &= |D\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - |V\rangle) &= |A\rangle \\ |H\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|A\rangle + |D\rangle)\end{aligned}$$

Видим, что наш легитимный пользователь, который настроил свой прибор на детектирование состояния $|A\rangle$, в 50 % случаев будет получать ошибку, он не будет получать клик, потому что здесь всего лишь 50 % вероятность получить клик в этом состоянии. Таким образом, злоумышленник будет вносить ошибки и это неизбежно.

Системы шифрования. Квантовое распределение ключа

Значит, давайте рассмотрим теперь, как можно эту интуицию использовать для того, чтобы передавать секретные ключи для систем шифрования.

Как вообще устроена система шифрования? Они бывают двух типов: с открытым ключом и закрытым ключом, симметричное шифрование и асимметричное. Сейчас

большинство систем используют открытый ключ. Они основаны, на том, что существуют так называемые односторонние функции.

Есть некая математическая процедура, которая позволяет взять сообщение, взять известный ключ, зашифровать его, а вот обратить эту процедуру очень сложно. Но, пример такой функции – функция, которая раскладывает большое целое число на простые множители. Если дано два простых больших числа, то перемножить их не сложно. Можете просто взять их и перемножить алгоритмом, грубо говоря, типа в столбик, который полиномиально быстрый, он вычисляется не более чем за полиномиальное количество операции на компьютере. А вот обратная процедура, к сожалению, сложная. Для нее неизвестно никакого алгоритма, который бы делал это за полиномиальное количество операций. Это значит, что сложность разложения числа на простые множители возрастает.

Для лучших существующих алгоритмов чуть-чуть судэкспоненциально, но очень быстро, то есть на достаточно давать несколько бит это число и разложить его уже будет невозможно на самом мощном компьютере, который существует. Ну, собственно, вот такими функциями пользуются для того, чтобы организовать систему шифрования с открытым ключом. Ну, детали это как бы целая наука. Вдаваться в подробности не будем.

Но в чем здесь проблема? Есть ли здесь проблема или нет зависит, конечно, от степени паранойи. То есть, если бы предполагается, что воображаемый противник обладает неограниченной вычислительной мощностью, то как бы можете видеть здесь проблему, потому что опять-таки заранее не знаете, что нет такого алгоритма. Может быть, он не уже додумался, это не доказано, большая часть алгоритмов в шифровании основаны на разложении числа на простые множители или на аналогичных дискретных алгоритмах, а для них не существует доказательства того, что нет таких алгоритмов.

Это некоторое поверье, которое, в общем, большая часть математиков разделяет, но доказательства строго нет. С другой стороны, если опять-таки предполагаете всемогущего противника и у него может быть квантовый компьютер. Один из основных алгоритмов, собственно, ради которого квантовый алгоритм строится – это алгоритм Шора, который позволяет быстро за полиномиальное количество операций факторизовать большие числа. Поэтому, если у противника есть квантовый компьютер, то он может взломать ваш код.

Можно ли эту ситуацию как-то исправить? Ответ да, конечно, можно. Существует, принципиально, невзламываемые шифры, а так сказать одноразовые блокноты

или шифр Вернама. Рассмотрим, как он устроен. Пусть есть сообщение, это последователь битов:

$0, 1, 1, 0 \dots 1$ – сообщение

к этому сообщению вас должен быть ключ:

$1, 0, 1, 0 \dots 0$ – ключ

На эту последовательность накладывается два условия: во-первых, ее длина должна быть равна длине сообщения и, во-вторых, это последовательность должна быть обстоятельством последовательности случайных битов. То есть нули и единицы в ней должны быть независимы между собой, и, вероятность появления на каждом месте ли нуля или единицы должна быть ровно $\frac{1}{2}$. как получить зашифрованное сообщение? вы берете и складываете вот это дело по моду два, то есть делаете исключающее побитовый между сообщением и ключом.

На выходе получим:

$1, 1, 0, 0 \dots 1$ – зашифрованное сообщение

Чтобы понять, что это сообщение для подслушивателя, который перехватил его, будет выглядеть, как случайная последовательность бит. Собственно, она будет настолько случайной, случаен именно ключ, поэтому для него это полная абракадабра. Единственный способ восстановить исходное сообщение для него – это перебирать все возможные значения этих битов до тех пор, пока он не получит то, что было исходно. Это 2^n операций. Во-первых, это очень медленно, во-вторых, таким перебором можно в принципе прочесть все, что угодно, вплоть до любых интересных литературных произведений. То есть, вот в таком смысле, этот шифр в принципе не взламывается. Но против тупого перебора не может быть защиты, и всегда можете подобрать свою последовательность. Но на практике это конечно, не реализуемо.

В чем проблема? Почему этим не пользуются? Проблема: как этот ключ передать. То есть у вас два пространственно-разделенных абонента, которые хотят пообщаться. Они должны иметь один ключ, который у них должен в точности совпадать и при этом он не должен быть известен никому, кроме них. Только тогда они смогут спокойно, замечательно пользоваться этой штукой.

Также заметим, что этот ключ нужно регулярно обновлять, то есть вы можете, конечно, заранее заготовить несколько ТБ этого ключа, но когда-нибудь он закончится. Поэтому есть несколько способов: первый способ – можно взять жесткий диск с несколькими ТБ ключа, сесть в самолет и отвезти. Но периодически и его нужно обновлять.

Одноразовым блокнотом мало кто пользуется на самом деле. Есть некая смесь: выберете ключ, который чуть короче, чем сообщение, но используете хитрые алгоритмы, которые позволяют вам более коротким ключом забрать более длинные сообщения. Так что его все равно сложно будет очень разгадать, но все равно даже этот короткий ключ, но его надо иногда обновлять.

И собственно это проблема, которая в классической криптографии не разрешима. Это невозможно сделать гарантировано секретно. Здесь как раз на помощь приходит квантовая теория информации со всеми ее сложностями: с теоремой о запрете копирования, с ошибками, которые вносят измерения, с неразличимостью неортогональных состояний. Собственно, квантовую криптографию правильно называть квантовым распределением ключа, потому что само шифрование классическое. Оно решает только проблему распределения ключа.

Протокол BB84

Первый алгоритм распределения ключа был придуман в 84 году Чарльзом Беннетом и Жилем Brassаром и по их именам носит название «BB84». Во-первых, он исторически первый. Во-вторых, он, наверное, на более простой для восприятия.

Есть два легитимных пользователя. Одного, условно, будем называть Алисой, а другого – Бобом. Это принятые в криптографической среде термины. Криптографы любят называть Алиса и Боб, а подслушивателя называют Евой. Рассмотрим, как они действуют. Между Алисой и Бобом есть некий квантовый канал связи:

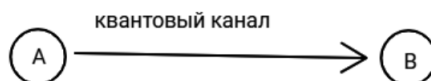


Рис. 11.17. Квантовый канал связи между Алисой и Бобом

Терминология может ввести в заблуждение на самом деле. Канал, конечно, никакой не квантовый, а совершенно обычный, классический канал. Например, может быть оптоволокно или просто участок атмосферы между двумя телескопами. В общем, Алисе и Бобу нужно уметь обмениваться между собой каким-то образом кубитами, которые они кодируют.

Пусть для простоты рассмотрим поляризацию одиночных фотонов и помощью модели для кубита.

Пусть кубит – поляризация фотона, значит, задача Алисы взять последовательность случайных битов, которые она сгенерировала генератором случайных чисел.

Это тоже целая история: откуда взять хороший генератор случайно чисел. Но пусть у нее есть генератор случайно чисел, который выдает ряд случайных битов, которые она кодирует в двух базисах.

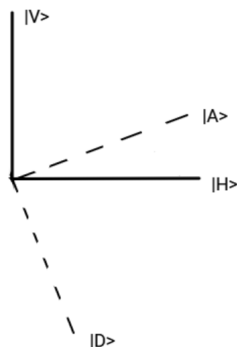


Рис. 11.18. Базисы для Алисы

Не важно, как они устроены, главное, что есть два базиса и замечательное свойство у них такое, что, если возьмем скалярное произведение любого вектора из одного базиса на любой вектор другого, то получится $\frac{1}{\sqrt{2}}$.

$$| \langle A|H \rangle | = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$| \langle D|H \rangle | = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$| \langle A|V \rangle | = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$| \langle D|V \rangle | = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Однако, такие базисы называются взаимно-смещенными. То есть кодирование замечательно тем, чем если Алиса кодирует свой фотон в нормальном базисе, а злоумышленник пытается сделать измерение в другом, то для него любые исходы равновероятны. То есть он никакой информации для себя из нее не извлекает. Значит она кодирует, она выбирает базис случайно. То есть у Алисы есть два генератора случайных чисел: один генератор сгенерировал ключ, а второй говорит какой базис ей выбрать, например, вот пусть она хочет закодировать первый нолик, она выбирает случайным образом базис, предположим, она выбрала нормальный базис. Значит нулю соответствует состояние H и она посылает его Бобу, второй раз: у нее есть единица и генератор случайных чисел сказал кодировать в другом базисе. Здесь единичке соответствует состояние поляризованной под 45. Она после его Бобу тоже.

Боб на своей стороне. У него тоже есть генератор случайных чисел, которые в зависимости от того, 0 или 1, он выбирает базис в котором мерить. То есть у него тоже есть два базиса:

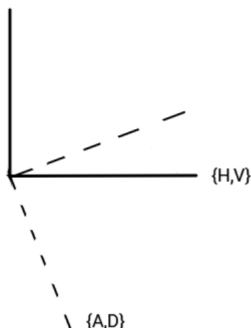


Рис. 11.19. Базисы для Боба

Он производит измерение и получает какой-то исход, записывает его у себя. Они совершают эту процедуру пока ключ не закончится после это у них получается две строки.

1,0,1,0...0 – Алиса

1,1,1,0...0 – Боб

В них иногда возникают ошибки. Они возникают почему? Потому что Алиса и Боб независимо, совершенно, выбирают базисы, в которых они измеряют, и если они выбрали разные базисы, то иногда в 50 % случаях при этом будет возникать ошибка, поэтому примерно четверть битов будет содержать неправильные значения для того, чтобы от этого избавиться, у них есть классический канал связи. Еще классический канал, по которому они связываются между собой и Алиса говорит, в каком базисе в каждой из посылок она осуществляла кодирование, но уже после того, как информация распределена, и если базисы совпадают, они оставляют этот бит, если базисы не совпадают они соответствующие биты вычеркивают.

Таким образом, они могут гарантировать, что на оставшихся позициях у них должно быть идентичные биты, и если нет подслушивателя, теперь, если в середине вклинивается подслушиватель, что он может сделать, может сделать довольно хитрую стратегию.

Собственно, есть целая наука о том, как устроить оптимальное подслушивание и как с ним потом бороться на простейшую стратегию для иллюстрации, а может

просто начать мерить опять-таки также как притворится Бобом и посылать результат своих изменений, понятно, что при этом, поскольку он понятия не имеет в каких базисах мерила Алиса до тех пор пока она этого не скажет, а потом фотон уже улетел, весь сеанс распределения уже закончен. Он будет вносить ошибки, то есть вот в этом уже просеянном ключе останутся ошибки и их можно заметить, если они будут замечено, то значит вы сможете узнать, что там подслушиватель.

Плюс еще в том, что если их достаточно мало, но для каждого протокола, то это отдельно математический вопрос, для «BB84» можно сказать – это 11% и ошибок меньше 11%, то вы можете с помощью неких классических операций сжатия добиться того, чтобы у подслушивателя осталось сколь угодно мало информации о вашем исходе ключе это гарантирует вам секретность распределения ключа.

Это решает одно, из ключевых проблем в криптографии. Эти системы существуют, они доступны коммерчески, вы можете в принципе для своего банка такую систему купить.

Лекция 12. Квантовая запутанность. Продолжение

Квантовая запутанность

В прошлый раз мы поговорили немного о квантовой информации, ввели понятие кубита, рассмотрели некоторые простейшие приложения, а именно один из протоколов квантового распределения ключа. Выяснили, что преимущество, которое дает кодирование информации в квантовых системах, в частности возможность обеспечить секретность передачи ключа в квантовой криптографии, во многом обусловлено случайностью квантовых измерений. То есть тем, что исход квантового измерения заранее непредопределен. Постараемся пояснить, в каком смысле эта случайность истинна и по сравнению с псевдослучайностью. Для этого будет недостаточно кубитов, придется рассмотреть составные системы, усложнить задачу.

Оказывается, что достаточно будет системы уже из двух кубитов. Предположим, что есть два кубита, одного из них назовем условно

$$E\{|0\rangle_A|1\rangle_A\} \rightarrow H]_A$$

есть гильбертово пространство, имеющее такой базис. Это гильбертово пространство, соответствующее кубиту A , произвольное состояние этого кубита может быть представлено как суперпозиция этих двух базисных векторов с произвольными комплексными коэффициентами, с выполнением условия нормировки. То есть, любой вектор из этого пространства может быть представлен в виде

$$\begin{aligned} |\Psi_A\rangle &\in H]_A \\ |\Psi_A\rangle &= C_1|0\rangle_A + C_2|1\rangle_A \\ |C_1|^2 + |C_2|^2 &= 1 \end{aligned}$$

На коэффициенты C_1 и C_2 накладывается условие нормировки, поскольку их квадраты модуля интерпретируются как вероятности, то они должны быть нормированы и суммироваться в единицу.

Есть вторая система, назовем ее B , у нее тоже есть базис

$$\{|0\rangle_B|1\rangle_B\} \rightarrow H]_B$$

это тоже двумерное комплексное линейное пространство. Теперь есть составная система, то есть кубит A , кубит B , мы хотим рассмотреть их вместе, как будет устроено пространство состояний этой составной системы?

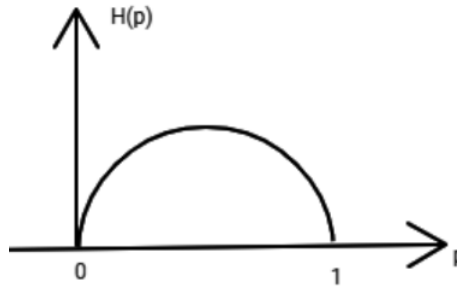


Рис. 12.1. Составная система

Достаточно просто написать в нем базис, базис будет просто произведением соответствующих базисных векторов, такие формальные пары

$$|0\rangle_A|0\rangle_B, |0\rangle_A|1\rangle_B, |1\rangle_A|0\rangle_A, |1\rangle_A|1\rangle_B$$

Есть четыре базисных вектора, но принцип суперпозиции требует, чтобы состояние составной системы могло быть произвольной суперпозицией этих четырех базисных векторов с комплексными коэффициентами. Принцип комплексной суперпозиции — это такой краеугольный камень квантовой теории, поэтому произвольное состояние здесь запишется в виде

$$|\Psi_{AB}\rangle = C_1|0\rangle_A|0\rangle_B + C_2|0\rangle_A|1\rangle_B + C_3|1\rangle_A|0\rangle_A + C_4|1\rangle_A|1\rangle_B$$

естественно коэффициенты C_1, C_2, C_3, C_4 нормированы точно так же

$$\sum_i |C_i|^2 = 1$$

Такая конструкция называется *тендерным произведением*, то есть

$$|\Psi_{AB}\rangle = C_1|0\rangle_A|0\rangle_B + C_2|0\rangle_A|1\rangle_B + C_3|1\rangle_A|0\rangle_A + C_4|1\rangle_A|1\rangle_B \in H_{AB} = H_A \otimes H_B$$

Конструкция очень простая — мы берем два базиса, составляем из них упорядоченные пары и говорим, что это базис в новом пространстве. С математической точки зрения вроде бы ничего сложного вот, но заметим, что есть довольно удивительные свойства, то есть можно выбрать такие коэффициенты C_1, C_2, C_3, C_4 , что $|\Psi_{AB}\rangle$ не будет представим в виде произведения двух векторов отдельно из пространства A и пространства B .

Например, рассмотрим такое состояние

$$|\Psi_{AB}^{(-)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A|1\rangle_B - |1\rangle_A|0\rangle_B)$$

Вычислением можно проверить, что это состояние нельзя записать в виде

$$|\Psi_{AB}^{(-)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A|1\rangle_B - |1\rangle_A|0\rangle_B) \neq (\alpha|0\rangle_A + \beta|1\rangle_A)(\gamma|0\rangle_B + \delta|1\rangle_B)$$

то есть это состояние устроено таким образом, что у каждого из кубитов по отдельности нет определенного вектора состояния или определенной волновой функции. А у всей пары вместе она вполне себе есть. Это можно проверить вычислением, то есть просто перемножить и посмотреть что ни при каких α, β, γ и комплексных не получится это состояние? Всегда будут дополнительные слагаемые, от которых никак не удастся избавиться. Такие состояния, которые не представимы в виде произведения состояний кубитов, по отдельности называются *перепутанными* или *запутанными* (англ. entangled). Это состояние, в котором есть корреляции. В чем будут проявляться эти корреляции?

Рассмотрим такой эксперимент — пусть есть некий источник, из которого вылетают пары частиц в состоянии $|\Psi_{AB}^{(-)}\rangle$, но для простоты можно думать, что это фотоны, соответственно кубиты — это поляризационные состояния, то есть 0 — горизонтально поляризованное состояние, 1 — вертикально поляризованное состояние.



Рис. 12.2. Некий источник, из которого вылетают пары частиц в состоянии $|\Psi_{AB}^{(-)}\rangle$

Далее есть два удаленных наблюдателя, одному попадает частица с индексом A , а второму попадают частицы с индексом B , и они производят над ними какие-то измерения.

Как будет устроена статистика этих измерений? Если посмотреть на это состояние внимательно, то становится понятно, что их результаты будут коррелированы, точнее антикоррелированы, то есть, если участник A , назовем его «Алисой», получает 0, то «Боб» получит 1 и наоборот, если «Алиса» получает 1, то «Боб» получит 0. Так будет всегда, ну это не очень удивительно, потому что легко себе можно представить классическую систему, которая обеспечит такие же точно корреляции. Можно в качестве этого источника смоделировать следующую процедуру, предположим, есть два

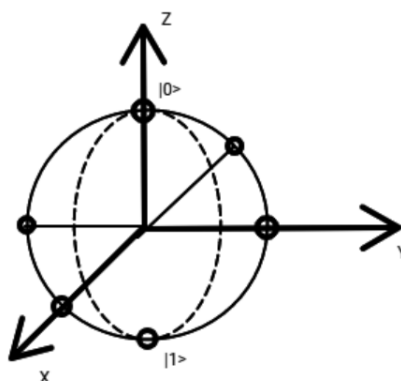


Рис. 12.3. Некий источник, из которого вылетают пары частиц в состоянии $|\Psi_{AB}^{(-)}\rangle$ с наблюдателями А и В

черных ящика, в них раскладываем шары разных цветов, например, черный и белый. Если в один ящик класть черный шар, то в другой обязательно белый, потом отправить эти шары: один на Марс а другой на Венеру, там два наблюдателя, которые ничего не знают про существование шаров, открывают эти коробки и обнаруживают либо черный шар, либо белый, и так повторяется – много коробок, много посылок, много шаров. Они всегда видят антикоррелированный результат, они заранее не могут предсказать, что у них там будет, они с вероятностью $\frac{1}{2}$ получают либо черный шар, либо белый, но потом, когда они встретятся или как-то свяжутся по классическому каналу связи, они обнаружат, что когда «Алиса» доставала черный шар, то «Боб» все время белый, или наоборот. Наверное они удивятся этим корреляциям, но естественной гипотезой которых объяснить, будет наличие человека, который раскладывает эти шары. Ничего вроде бы удивительного, тогда в чем отличие в квантовой теории?

Отличие заключается в том, что это состояние обладает удивительным свойством, они инвариантны относительно локальных смен базисов, предположим что сделано некое унитарное преобразование, которое как-то поворачивает базис

$$\begin{aligned} |0_A\rangle &\xrightarrow{U_A} \alpha|0_A\rangle + \beta|1_A\rangle \\ |1_A\rangle &\xrightarrow{U_A} \gamma|0_A\rangle + \delta|1_A\rangle \end{aligned}$$

Совершенно независимое другое преобразование дальше делаем с кубитом, который у «Боба»

$$\begin{aligned} |0_B\rangle &\xrightarrow{U_B} \tilde{\alpha}|0_B\rangle + \tilde{\beta}|1_B\rangle \\ |1_B\rangle &\xrightarrow{U_B} \tilde{\gamma}|0_B\rangle + \tilde{\delta}|1_B\rangle \end{aligned}$$

Мы повернули базис каким угодно образом, единственное что требуется – чтобы эти векторы по-прежнему остались ортогональными, то есть

$$\begin{aligned} |0_A\rangle &\xrightarrow{U_A} \alpha|0_A\rangle + \beta|1_A\rangle = |0'_A\rangle \\ |1_A\rangle &\xrightarrow{U_A} \gamma|0_A\rangle + \delta|1_A\rangle = |1'_A\rangle \\ |0_B\rangle &\xrightarrow{U_B} \tilde{\alpha}|0_B\rangle + \tilde{\beta}|1_B\rangle = |0'_B\rangle \\ |1_B\rangle &\xrightarrow{U_B} \tilde{\gamma}|0_B\rangle + \tilde{\delta}|1_B\rangle = |1'_B\rangle \end{aligned}$$

поскольку эти операторы унитарные, то сохраняется произведение, то есть

$$\langle 0'_{AB} | 1'_{AB} \rangle = 0$$

Совершенно независимо, каким угодно образом мы повернули базис, оказывается, что состояние $|\Psi_{AB}^{(-)}\rangle$ при этом не поменяется, то есть оно преобразуется следующим образом, и выглядит в новом состоянии точно так же. Кубит с индексом A поворачивается преобразованием с индексом A , тот кубит который B поворачивается преобразованием с индексом B .

$$|\Psi_{AB}^{(-)}\rangle \xrightarrow{U_A \otimes U_B} \frac{1}{\sqrt{2}} (|0'\rangle_A |1'\rangle_B - |1'\rangle_A |0'\rangle_B)$$

Можно немножко усложнить эксперимент, то есть теперь два экспериментатора «Алиса» и «Боб» могут менять свои измерения, могут выбирать их так как им нравится, если, например, поляризацию фотонов, то помимо просто светоделителя, который производит измерение в базисе HV , он пропускает горизонтальный и отражает вертикальный, два детектора, можно повернуть его примерно на 45 градусов или на произвольный угол совершенно независимо. Если эти углы ориентированы правильным образом относительно друг друга, то они будут видеть по-прежнему антикоррелированные результаты, хотя делают они это совершенно независимо, ничего не зная друг о друге. В аналогии с коробочками получается любопытная ситуация — когда эта коробка приезжает на Марс экспериментатору, зависит от того как он ее откроет — сверху или снизу, цвет шара меняется, то есть он может быть черно-белый или красно-синий. Он своим действиями может на это влиять, результат не предопределен и то как он открывает — это его произвол. Если они оба делают это со своими коробочками в тех случаях, когда они открывают их одним и тем же способом, они получают абсолютно коррелированный результат, вне зависимости от способа, которым они открывают. Если ощущение, что частицы каким-то образом знают друг о друге. Чтобы обеспечить всегда коррелированные результаты измерений необходимо, чтобы одна частица каким-то образом получала информацию о том, что происходит

со второй. То есть чтобы установка «Боба» была каким-то образом коррелирована с установкой «Алисы» при том, что никаких ограничений на то где они расположены не накладывается, они могут быть разнесены в пространственно подобным интервалом, так, чтобы никакой коммуникации между ними быть не могло, и они могут производить свои измерения одновременно, с помощью заранее синхронизированных часов. Таким образом, чтобы световой сигнал не смог за то время, которое нужно для выполнения своих измерений распространиться от «Алисы» к «Бобу», чтобы никакой физической связи между ними быть не могло. Тем не менее, корреляции остаются, причем объяснение с общей причиной, с неким подобием человека, раскладывающего шары в коробки, уже сталкивается с некоторыми проблемами, потому что результат измерения зависит от того каким образом и в каком базисе это измерение происходит.

Эта ситуация очень не нравилась Эйнштейну, и суть знаменитой дискуссии Бора-Эйнштейна об основаниях квантовой теории, она сводилась к этому — Эйнштейн говорил, что этот недетерминизм в квантовой теории на самом деле нефундаментален, просто мы не знаем некую более фундаментальную теорию, которая на самом деле детерминистична, которая должна предсказывать исходы квантовых измерений точно также как классическая механика траектории частиц, точно так же как уравнение Шрёдингера предсказывает как будет выглядеть волновая функция в любой заданный момент времени, точно так же более общая теория квантовой механики должна предсказывать исход измерений. То есть эта случайность такая же кажущаяся, как с монеткой - мы просто недостаточно хорошо знаем любое уравнение динамики управляющее этой монеткой, либо начальные условия. Поэтому кажется, что это процесс случайный, на самом деле конечно можно все просчитать, если есть некое знание, которое недоступно. Бор же ему отвечал, что на самом деле эта вероятность фундаментальна и квантовая теория так устроена, и бессмысленно задавать природе какие-то вопросы о том какой будет исход в том или ином квантовом измерении, это истинные случайности.

Вопрос - кто же из них был прав? Кажется, что этот вопрос абсолютно философский и ответить на него можно либо так, либо так, в зависимости от вкуса. Оказывается, что можно ответить на этот вопрос вполне определенно, более того этот ответ будет допускать экспериментальную проверку. Попробуем выяснить как это делается.

Экспериментальная проверка и неравенства Белла

Для начала разберемся с тем как можно математически формализовать утверждение о том, что есть некоторые скрытые переменные, то есть некоторые парамет-

ры, знание которых обеспечило бы определенность исхода квантового измерения, если бы мы их знали, то могли бы все предсказать.

Экспериментальное устройство у «Алисы» и экспериментальное устройство у «Боба» — некий черный ящик, у этого черного ящика есть, условно, две кнопки. На самом деле здесь может быть сколько угодно но достаточно будет двух. Нажатие на эту кнопку будет символизировать выбор того или иного измерения, то есть тот самый произвол, который они могут делать. Соответственно выбор этих измерений у «Алисы» будем обозначать переменной x , она будет для начала принимать два значения — 0 и 1, а у «Боба» — y . Так же есть две лампочки, два светодиода - красный и синий, тот который из них загорается будет символизировать исход измерения.

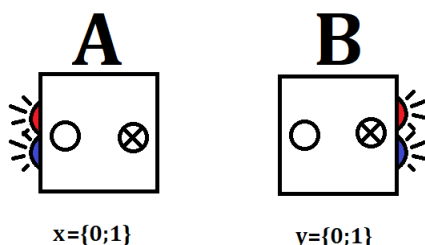


Рис. 12.4. Экспериментальное устройство

Исходы измерения будут a у «Алисы» и b у «Боба», для удобства мы будем им приписывать значение $+1; -1$, так чтобы среднее было равно 0. В эксперименте мы получаем некую статистику — это вероятность исходов a и b при условиях, что были выбраны установки экспериментальных приборов x и y , то есть «Алиса» нажала на кнопку соответствующую x , а «Боб» нажал на кнопку соответствующую y , они получили исходы a и b , соответственно. Это та статистика, которая получается в результате эксперимента.

$$p(a, b | x, y)$$

Мы повторяем это много раз и можем из наблюдаемых частот оценить эти вероятности, больше ничего не дано.

Утверждение о существовании неких локальных скрытых параметров, которые определяют на самом деле исходы этих измерений, которые кажутся случайными, сводится к тому что все корреляции, которые сидят в этом распределении вероятности исходов обусловлены незнанием некоторых параметров, то есть

$$p(a, b | x, y) = \int d\lambda \rho(\lambda_{AB}) p(a, b | x, y, \lambda)$$

λ - это те самые переменные, которые не известны. То есть помимо выбора способа измерения, который произведен, есть еще некоторые параметры λ , которые определяют корреляции, которые здесь будут наблюдаться. В такой модели можно описать все что угодно, это произвольная форма записи, она позволяет описать в том числе и статистику, которая наблюдается в квантовых измерениях. Проблемы начинаются когда мы хотим на эти параметры наложить какие-то разумные физические ограничения, например, условия *локальности* - исход измерения «Алисы» не должны зависеть от выбора установок и от исходов измерений на станции «Боба», потому что мы разнесли их как на очень большое расстояние, всяческая связь между ними запрещена, если мы придерживаемся стандартных релятивистских предположений, то скорость распространения любого взаимодействия ограничена скоростью света, поэтому никак не может зависеть от исходов измерений у «Боба» исходы измерения «Алисы» не могут, только лишь через параметры λ , то есть локальность означает дословно следующее

$$p(a, b|x, y, \lambda) = p(a|x, \lambda)p(b|y, \lambda)$$

То есть любая зависимость исходов от установок тут может быть только через параметры λ , то есть только через эти параметры, описывающие систему, а напрямую никакого воздействия быть не может. Второе условие, которое есть – это то, что

$$\int d\lambda \rho(\lambda_{AB}) p(a, b|x, y, \lambda)$$

в общем случае, в принципе, может зависеть от выбора измерений.

$$\rho(\lambda|x, y) = \rho(\lambda)$$

То есть значение этих параметров не зависит от выбора способа измерений, которые делает «Алиса» и «Боб». Если бы между ними были корреляции то это бы означало, что и наоборот выбор измерений каким-то образом зависит от этих скрытых переменных, но этот выбор делаем мы сами, то есть экспериментатор либо с помощью какого-то генератора случайных чисел, либо просто как ему вздумается выбирает способ измерения. Если мы хотим сказать, что этот способ измерения каким-то образом предопределён значениями скрытых переменных, то мы отказываемся от научного метода вообще, потому что наша свобода сделать такое измерение какое мы хотим - это основа в принципе любого эксперимента. Эти два естественных, казалось бы, предположения приводят к определенным ограничениям на это распределение вероятностей и на соответствующей статистике от этого распределения вероятности.

Рассмотрим следующие величины, назовем их корреляторами. Прделаем некое математическое упражнение в элементарной теории вероятности. Без него, к сожалению обойтись никак не получится, потому что целью будет получить некоторое неравенство, которое при выполнении этих двух условий должно обязательно выполняться. А дальше мы его будем нарушать. Рассмотрим такие корреляторы $\langle a_x, b_y \rangle$ которые по определению это

$$\langle a_x, b_y \rangle = \sum_{a,b} ab p(a, b | x, y)$$

Если мы на распределение вероятностей наложим это условие, плюс условие локальности и независимости выбора измерения параметров λ , то для коррелятора можуж получить следующее выражение

$$\int d\lambda \left(\rho(\lambda) \sum_{a,b} p(a|x, \lambda) p(b|y, \lambda) \right)$$

Теперь можно это преобразовать следующим образом

$$\int d\lambda \rho(\lambda) \left(\sum_a a p(a|x, \lambda) \right) \left(\sum_b b p(b|y, \lambda) \right)$$

Это обеспечивает локальность, но на самом деле это проинтегрированный коррелятор

$$\int \langle a_x \rangle \langle b_y \rangle \rho(\lambda) d\lambda$$

Корреляторы разваливаются на одночастичные, а все корреляции идут только через зависимости от параметров λ .

Теперь рассмотрим величину, назовем ее S

$$S = \langle a_0 b_0 \rangle + \langle a_0 b_1 \rangle + \langle a_1 b_0 \rangle - \langle a_1 b_1 \rangle$$

Можно представить ее в виде такого же интеграла

$$\int d\lambda \rho(\lambda) S_\lambda$$

$$S_\lambda = \langle a_0 \rangle \langle b_0 \rangle + \langle a_0 \rangle \langle b_1 \rangle + \langle a_1 \rangle \langle b_0 \rangle - \langle a_1 \rangle \langle b_1 \rangle$$

$$\langle a_0 \rangle \langle b_0 \rangle + \langle a_0 \rangle \langle b_1 \rangle + \langle a_1 \rangle \langle b_0 \rangle - \langle a_1 \rangle \langle b_1 \rangle \leq |\langle a_0 \rangle| |\langle b_0 \rangle + \langle b_1 \rangle| + |\langle a_1 \rangle| |\langle b_0 \rangle - \langle b_1 \rangle|$$

Дальше $\langle a_0 \rangle$ и $\langle a_1 \rangle$ - они от нуля до единицы, потому как мы выбрали a . То есть модуль $|\langle a_{0,1} \rangle| \leq 1$, отсюда следует что это неравенство можно продолжить и написать

$$S_\lambda \leq |\langle b_0 \rangle + \langle b_1 \rangle| + |\langle b_0 \rangle - \langle b_1 \rangle|$$

Предположим что $b_1 < b_0$, то тогда

$$S_\lambda \leq |\langle b_0 \rangle + \langle b_1 \rangle| + |\langle b_0 \rangle - \langle b_1 \rangle| = |\langle b_0 \rangle| + |\langle b_1 \rangle| + |\langle b_0 \rangle| - |\langle b_1 \rangle|$$

тогда $|\langle b_1 \rangle|$ сокращается и получается

$$2|\langle b_0 \rangle|$$

Если наоборот $b_1 > b_0$, то раскрываем с противоположным знаком и получаем, что это меньше чем $2|\langle b_1 \rangle|$. Поэтому в итоге мы ограничили нашу величину

$$S_\lambda \leq 2\max\{|\langle b_0 \rangle|, |\langle b_1 \rangle|\}$$

$|\langle b_0 \rangle|$ и $|\langle b_1 \rangle|$ тоже от нуля до единицы, поэтому

$$S_\lambda \leq 2\max\{|\langle b_0 \rangle|, |\langle b_1 \rangle|\} \leq 2$$

Дальше когда мы посмотрим на саму величину S , которая просто средняя с неким распределением вероятностей параметров λ , понятно что это усреднение тоже не может увеличить эту величину, поэтому мы получаем неравенство

$$S \leq 2$$

Оно замечательно тем, что мы можем попробовать провести реальный эксперимент и проверить выполняется это неравенство или нет, но в лекционной аудитории эксперимент мы провести не можем, но дадим описание экспериментальной ситуации, в которой с помощью источника перепутанных пар частиц, то есть тех самых перепутанных кубитов в состоянии $|\Psi_{AB}^{(-)}\rangle$, мы неравенство нарушим.

Это неравенство впервые написал Джон Белл в 60-х годах, но немного в другом виде, конкретно в виде $S \leq 2$ оно появилась в работе Клаузера-Хорна-Шимони-Хольта неравенством Белла в форме Клаузера-Хорна-Шимони-Хольта или *CHSH*. Таких неравенств можно написать много, есть целое семейство неравенств Белла, они все чем-то хороши.

Вернемся к нашему эксперименту, у нас есть две установки в каждой установке производятся измерения с кубитом, например, поляризационным или спина $\frac{1}{2}$, значит выборам измерений x и y будет отвечать выбор наблюдаемых, которые мы мереем,

$$\begin{aligned}x &\rightarrow \vec{x}\vec{\sigma} \\y &\rightarrow \vec{y}\vec{\sigma} \\ \sigma &= \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}\end{aligned}$$

Это матрицы Паули.

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

А векторы $\vec{x}$ и $\vec{y}$ будут отвечать выбору измерений, то есть если мы хотим сделать измерение $\vec{x}$, то мы составляем некую комбинацию этих операторов, получаем наблюдаемую и ее измеряем, соответственно корреляторы, которые там будут - это средние значения с соответствующей волновой функцией $|\Psi_{AB}^{(-)}\rangle$.

Возьмем систему в таком состоянии

$$|\Psi_{AB}^{(-)}\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A|1\rangle_B - |1\rangle_A|0\rangle_B)$$

Каждой наблюдаемой соответствует определенной базис, базис собственных векторов, можно сказать, что меряется наблюдаемая, можно, что производится измерение в базисе собственных векторов, которые мы поворачиваем. Первое что предстоит сделать — это получить формулу описывающую распределение вероятностей, точнее формулу для коррелятора S в квантовой теории.

Предположим что стандартная квантовая теория хорошо описывает нашу реальность, посмотрим что она предсказывает для коррелятора S . Посмотрим на средние значения для простоты наблюдаемых

$$\langle \Psi_{AB}^{(-)} | \vec{x}\vec{\sigma}_A \vec{y}\vec{\sigma}_B$$

Индексы A и B , которые здесь появились около матрицы Паули означают что эти матрицы действуют только на векторы с индексами A и B .

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A|1\rangle_B - |1\rangle_A|0\rangle_B)$$

подставляем

$$\langle \Psi_{AB}^{(-)} | \vec{x} \vec{\sigma}_A \vec{y} \vec{\sigma}_B = \frac{1}{2} (\langle 0_A | \langle 1_B | - \langle 1_A | \langle 0_B |) \vec{x} \vec{\sigma}_A \vec{y} \vec{\sigma}_B (\langle 0_A | \langle 1_B | - \langle 1_A | \langle 0_B |)$$

Распишем это все с учетом того, что этот оператор σ_A действует только на такие векторы $\langle 0_A |$, а σ только на векторы $\langle 0_B |$ тогдаполучается

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} [& \langle 0_A | \vec{x} \vec{\sigma}_A | 0_A \rangle \langle 1_B | \vec{y} \vec{\sigma}_B | 1_B \rangle - \langle 1_A | \vec{x} \vec{\sigma}_A | 0_A \rangle \langle 0_B | \vec{y} \vec{\sigma}_B | 1_B \rangle - \\ & - \langle 0_A | \vec{x} \vec{\sigma}_A | 1_A \rangle \langle 1_B | \vec{y} \vec{\sigma}_B | 0_B \rangle + \langle 1_A | \vec{x} \vec{\sigma}_A | 1_A \rangle \langle 0_B | \vec{y} \vec{\sigma}_B | 0_B \rangle \end{aligned}$$

Эти величины просто матричные элементы, соответствующие матрице.

$$\vec{x} = \{x_1, x_2, x_3\}$$

$$\vec{y} = \{y_1, y_2, y_3\}$$

тогда можно взять эти матрицы, подставить соответствующие матричные элементы, и тогда получится Если есть матрица

$$\begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} \\ a_{10} & a_{11} \end{pmatrix}$$

тогда $\langle 0_A | \vec{x} \vec{\sigma}_A | 0_A \rangle$ - это a_{00} и так далее.

$$-\frac{1}{2} [-x_3 y_3 - (x_1 + i x_2)(y_1 - i y_2) - (x_1 - i x_2)(y_1 + i y_2) - x_3 y_3]$$

Раскроем скобки и получим

$$\frac{1}{2} [2x_3 y_3 + 2x_2 y_2 + 2x_1 y_1]$$

Мы получаем, что

$$\langle \Psi_{AB}^{(-)} | \vec{x} \vec{\sigma}_A \vec{y} \vec{\sigma}_A | \Psi_{AB}^{(-)} \rangle = -\vec{x} * \vec{y}$$

Теперь нужно правильно выбрать векторы таким образом, чтобы для величины S получить что-нибудь любопытное.

Выберем векторы так



Рис. 12.5. Векторы x_n

$$\vec{e}_0 \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \longleftrightarrow x = 0$$

на стороне «Алисы» $x=0$

$$\vec{e}_1 \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \longleftrightarrow x = 1$$

на стороне «Алисы» $x=1$.

Первый экспериментатор выбирает свои измерения из двух вариантов, то есть у него есть 1_0 . Второй выбирает

$$\vec{g}_0 = -\frac{\vec{e}_0 + \vec{e}_1}{\sqrt{2}} \longleftrightarrow y = 0$$

$$\vec{g}_1 = \frac{\vec{e}_1 - \vec{e}_0}{\sqrt{2}} \longleftrightarrow y = 1$$

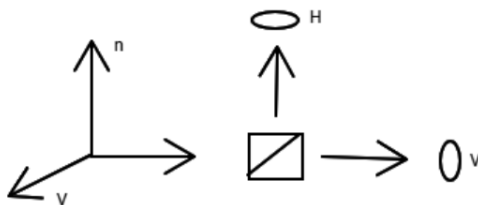


Рис. 12.6. Векторы g_n

Чтобы для величины S получить какое-нибудь значение, такой выбор соответствует максимально возможному значению величины S

$$S = \langle a_0 b_0 \rangle + \langle a_0 b_1 \rangle + \langle a_1 b_0 \rangle - \langle a_1 b_1 \rangle$$

Чему будет равно, например,

$$\begin{aligned}\langle a_0 b_0 \rangle &= -\vec{e}_0 * \vec{g}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \langle a_0 b_1 \rangle &= \langle a_1 b_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\end{aligned}$$

это скалярны произведения, а

$$\langle a_1 b_1 \rangle = -\vec{e}_1 * \vec{g}_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

Теперь все складываем и получаем то что хотели

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} = 2\sqrt{2} > 2$$

Такой эксперимент не сложно устроить. Впервые это было сделано в конце 80-х годов, делалось это для фотонов и для поляризационных состояний, если приготавливать поляризационные состояния соответственные вектору $\Psi^{(-)}$, производить с ним измерения согласно этой процедуре, то действительно получается $2\sqrt{2}$.

Это означает, что если эксперимент сделан аккуратно, то есть выполнены все те условия которые мы оговаривали, то это означает что то описание с помощью локальных скрытых параметров, которые мы пытались ввести не работает, это что равно в этом смысле исход квантового измерения истинно случаен, то есть наличие этих корреляций, которые нельзя описать как результат нашего незнания каких-то параметров, мы это только что строго доказали. Мы получили некоторое неравенство, которое должно выполняться для любой теории, которая, во-первых, удовлетворяет условию локальности, во-вторых, которая допускает независимый выбор измерений, в-третьих условие локальности, от него отказаться сложно, потому что есть теория относительности, есть релятивистская причинность и прямой отказ от этого приведет к противоречиям. То есть нужно будет ввести некие сигналы, которые распространяются со скоростью больше скорости света, но которые при этом не дают передавать информацию. Это тоже довольно сомнительные перспективы.

Приходится прийти к единственному выводу, что в споре Боре и Эйнштейна можно экспериментом поставить точку, и сказать, что действительно квантовые измерения истинно случайны, в том смысле, что нет никакого детерменистического параметра, который бы их на самом деле определил, то есть это не наше незнание, а фундаментальное свойство природы.

С точки зрения приложений это замечательно, потому что это позволяет сделать хороший генератор случайных чисел, то есть если все генераторы основанны на классической физике, даже если это не псевдослучайной последовательности, которые обычно используют в качестве генератора случайных чисел, а физический генератор, например, какой-нибудь прибор, который оцифровывает тепловой шум резистора и из них извлекает случайные биты, она все равно в некотором смысле псевдослучайна, потому что на самом деле мы знаем что есть какая-то динамика, которая управляет этим процессом, если бы мы ее знали, то вы могли бы предсказать точное значение напряжения на этом резисторе в любой момент времени. В то же время квантовая теория, как мы только что показали, позволяет сделать генератор случайных чисел свободным от каких бы то ни было предположений. То есть если взять источник одиночных фотонов, пропустить их через поляризатор, а дальше поставить второй поляризатор под 45 градусов и за ним идеальный счетчик фотонов

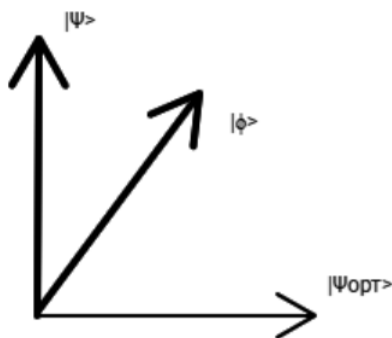


Рис. 12.7. Векторы g_n

Здесь два детектора, есть и щелкает один, то это исход 0, если щелкает второй, то исход 1.

Предсказать исход этого измерения, если все идеально, если настоящие идеальные однофотонные детекторы, если мы повернули ровно на 45 градусов, тогда распределение 0 и 1 будет абсолютно равномерным, то есть с вероятностью $\frac{1}{2}$? совершенно не смещенную последовательность. Причем никто не может сказать 0 или 1 мы получим в следующем измерении - это идеальный квантовый генератор случайных чисел. В реальности конечно все немного сложнее, но тем не менее мы можем достаточно близко приближаться к этой ситуации. Это важно для тех же криптографических применений, потому что $bb - 84$ и вообще все протоколы квантовых криптографии сводятся к протоколу распределения ключа, протокол распределения ключа, а ключ – это последовательность случайных битов. Вопрос – откуда эту последовательность

случайных битов брать? Ответ – настоящий генератор случайных чисел должен быть устроен примерно так.

Квантовая телепортация

Есть источник перепутанных пар, частицу с номером 1 мы отправляем «Алисе», частицу с индексом 2 мы отправляем «Бобу», они сколь угодно далеко, «Алиса» получает еще одну частицу под номером 3, ее задача сделать так, чтобы частица с номером 2, которая находится у «Боба» оказалась в таком же состоянии как частица с номером 3, которую она получила, при чем это состояние она не знает. Сначала

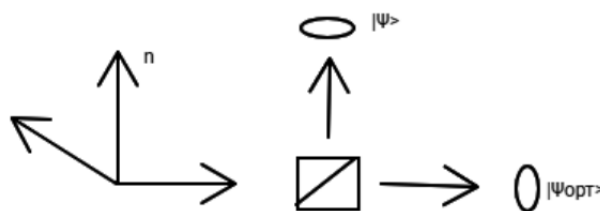


Рис. 12.8. Источник перепутанных пар

пишется совместное состояние

$$|\Psi_{123}\rangle = |\Psi^{(-)}\rangle |\Psi_3\rangle$$

$$|\Psi_3\rangle = \alpha|0\rangle_3 + \beta|1\rangle_3$$

Получается что

$$\Psi_{123} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha|0_1\rangle|1_2\rangle|0_3\rangle + \beta|1_1\rangle|0_2\rangle|1_3\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\alpha|1_1\rangle|0_2\rangle|0_3\rangle)$$

Теперь надо перейти в базис из этих магических состояний, это состояния Белал. Помимо $(-)$? с которым мы уже сталкивались, их еще три штуки

$$|\Psi_{12}^{(\pm)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0_1\rangle|1_2\rangle \pm |1_1\rangle|0_2\rangle)$$

$$|\Phi_{12}^{(\pm)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0_1\rangle|0_2\rangle \pm |1_1\rangle|1_2\rangle)$$

$$|0_1\rangle|1_2\rangle = |\Psi_{12}^{(+)}\rangle + |\Psi_{12}^{(-)}\rangle$$

Состояние будет следующим

$$|\Psi_{123}\rangle = \frac{1}{2}(|\alpha|1\rangle_3(|0\rangle_1|1\rangle_2 - |1\rangle_1|0\rangle_2) + \beta|0\rangle_3(|0\rangle_1|1\rangle_2 - |1\rangle_1|0\rangle_2))$$

Выражаем эти базисные векторы через новые, подставляем туда. Для того же самого состояния получаем

$$|\Psi_{123}\rangle = \frac{1}{2}[|\Psi_{12}^{(-)}\rangle(-\alpha|0\rangle_3 - \beta|1\rangle_3) + (|\Psi_{12}^{(+)}\rangle(-\alpha|0\rangle_3 + \beta|1\rangle_3) + \\ + |\Phi_{12}^{(-)}\rangle(\alpha|0\rangle_3 + \beta|1\rangle_3) + |\Phi_{12}^{(+)}\rangle(\alpha|0\rangle_3 - \beta|1\rangle_3)]$$

Получилось то, что если мы сделаем измерения в этом базисе, то есть если мы сделаем проекцию наших состояний частицы 1 и 2 на одно из этих четырех состояний, то третье окажется в одном из этих четырех.

Например, «Алиса» берет частицы 1 и частицу 3, частица 3 находится в каком-то состоянии

$$|\Psi_3\rangle = \alpha|0\rangle_3 + \beta|1\rangle_3$$

а частица B - это половина перепутанной пары. Дальше она делает некое измерение, которое сводится к тому, что она проецирует на одно из состояний Белла. Она получает один из четырех возможных исходов, если она получает исход соответствующий $(-)$, то она может с уверенностью констатировать, что у «Боба» частицы окажутся в состоянии $\frac{1}{2}[|\Psi_{12}^{(-)}\rangle(-\alpha|0\rangle_3 - \beta|1\rangle_3)]$, а это состояние с точностью до знака минус Ψ_3 , то есть если у «Алисы» исход измерения $(-)$, который она может закодировать двумя битами. То у «Боба» будет состояние $\Psi_2 = \alpha|0\rangle - \beta|1\rangle$. Все что ему нужно – перевернуть знак, но на самом деле не имеет значения, поэтому можно считать, что у него точно такое же состояние. Если она получила другой исход например $(+)$, тогда у «Боба» получается состояние, которое отличается знаком в первой суперпозиции. Ему нужно сделать над ним некоторые преобразования, чтобы привести его к тому виду, которому нужно, надо умножить на матрицу Паули сигма 3, тогда знак перевернется. Если она получает исход $(+)$, то у «Боба» получается $-\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$

$$\Psi_{12}^{(+)} \rightarrow 01 \implies -\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = -\sigma_3(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)$$

остальные два тоже отличаются просто неким локальным преобразованием. Поэтому протокол устроен очень просто «Алиса» делает измерение в Белловском базисе и сообщает «Бобу» результат. Есть классический канал связи и она сообщает ему два бита информации, в зависимости от этих двух битов, от того что он получил, «Боб»

делает некоторые унитарные преобразования U_x , где x – может быть одним из четырех. Тогда то, что он получает на выходе будет гарантированно таким же как так здесь все 2 конечно был игра будет гарантирован таким же как исходное состояние $|\Psi_3\rangle$.

Почему это не противоречит теореме о запрете копирования? Казалось бы, мы взяли переписали состояние, не зная его, на новую частицу. Конечно не переписали, потому что при измерении это состояние было уничтожено, после того как «Алиса» сделала проекционное измерение с кубиком 3 и своей половиной перепутанной пары, то от исходного состояния здесь не осталось ничего. Плюс «Алиса» не получила никакой информации об этом состоянии, передав два бита, она только гарантировала то, что «Боб», сделав соответствующее преобразование будет уверен что состояние такое, но ни «Алиса» ни «Боб» в процессе ничего про это состояние не узнали.

Никакой мгновенной передачи информации здесь не происходит, чтобы телепортация была успешна нужен обязательно канал связи, по которому мы должны передать два бита, которые скажут какое преобразование нужно будет сделать до тех пор пока мы это не сделали. Здесь будет совершенно случайная смесь и никакой информации из этого состояния, чтобы «Боб» не делал никакой информации о состоянии «Алисы» получить не сможет. Поэтому принципы локальности здесь тоже никак не нарушаются и сверхсветовая передача информации, конечно же невозможно.

Все эти, скажем так, странности квантовой теории, в частности, по случайности исходов измерения, к сожалению, с ними придется жить, то есть квантовая теория устроена так, она находит экспериментальное подтверждение, огромное количество экспериментальных подтверждений.



ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ