# ВОЛНОВАЯ ФИЗИКА

Курс лекций для ФМШ

Часть 2. СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

5. КВАНТЫ

А. П. Ершов

15 апреля 2011 г.

# Глава 5

# КВАНТЫ

Мы приступаем к изучению новой, квантовой, физики, развитие которой началось вместе с XX веком. Не так давно (19 декабря 2000 г.[1]) квантовой физике исполнилось 100 лет. Будет правильно начать с Планка и его знаменитой постоянной $\hbar$.

## 5.1 Постоянная Планка. Кванты

**Черное излучение.** Нагретые тела светятся. К 1900 г. экспериментаторы хорошо изучили это тепловое излучение и его спектр. Измеряли поток энергии из нагретой полости через малое отверстие наружу (модель абсолютно черного тела). Вышло, что при температуре $T$ поток энергии $q = \sigma T^4$, где $\sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-8}$ дж/(м$^2$с К$^4$) – **постоянная Стефана–Больцмана**, а частота, при которой больше всего излучается энергии, $\omega_* \propto T$.

В старой (классической) теории теплового излучения существовала так называемая **ультрафиолетовая катастрофа**. Полость содержит излучение с различными длинами волн. Каждая из этих волн – это независимое колебание, степень свободы электромагнитного поля. В классической физике на каждую колебательную степень свободы в тепловом равновесии приходится вполне определенная энергия $kT$, где $k = 1{,}38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана. Не видно было никаких препятствий к существованию сколь угодно коротких волн, так что их «набиралось» бесконечное количество. Тогда бесконечна энергия излучения, а вместе с ней и поток $q$, чего не наблюдается.

Если длина волны $\lambda$ мала, то частота $\omega = 2\pi c/\lambda$ велика. Чем короче («ультрафиолетовее») мы берем волны, то есть чем больше $\omega$, тем больше суммарная энергия излучения с частотами от нуля до $\omega$. Это и есть ультрафиолетовая катастрофа.

**Граничная частота. Постоянная Планка.** Раз чудес, вроде бесконечной энергии, не бывает, то для волн большой частоты что-то изменится. Приходится допустить, что при больших частотах энергия быстро спадает; стандартная же энергия $kT$ может полагаться только волнам достаточно малой частоты. Естественной границей этих режимов будет частота максимума спектра $\omega_*$. Ее пропорциональность температуре запишем в

[1] В этот день состоялся доклад М. Планка в германском физическом обществе.

«энергетической» форме (так как энергия, конечно, важнее частоты):

$$\hbar\omega_* \sim kT\,,$$

где $\hbar$ – коэффициент, получивший название постоянной Планка[2]. Величину его можно найти из потока световой энергии от нагретого тела. По современным данным

$$\hbar = 1{,}054 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{сек}\,.$$

**Кванты.** Предыдущая аргументация довольно тривиальна: раз колебаний слишком много, надо их дискриминировать. Основная идея Планка состояла в том, что энергия $\hbar\omega$ не только «отмечает» граничную частоту, но вообще имеет фундаментальное значение. Именно, излучение состоит из так называемых **квантов**, то есть долей, частичек. Квант с частотой $\omega$ имеет энергию $\hbar\omega$. Таким образом, энергия излучения частоты $\omega$ меняется не плавно, а дискретно, ступеньками вполне определенной «высоты». Нельзя увеличить эту энергию на $1{,}93\hbar\omega$, $0{,}5\hbar\omega$, $0{,}017\hbar\omega$, но можно – на $\hbar\omega$, $2\hbar\omega$, $2011\hbar\omega$. Когда энергия кванта превышает тепловую, $\hbar\omega \gtrsim kT$, такой квант тепловому движению становится трудно породить (вымораживание, которое кратко обсуждалось во втором семестре). Поэтому квантов больших частот мало, чем и разрешается парадокс. В результате удалось прекрасно описать экспериментальный спектр излучения черного тела. Кванты света называют еще **фотонами**.

Итак, существует новая фундаментальная постоянная $\hbar$. Постоянная Стефана – Больцмана $\sigma$ выражается через нее и, значит, является «менее фундаментальной»; точное выражение, со всеми коэффициентами, имеет вид: $\sigma = \pi^2 k^4/(60\hbar^3 c^2)$.

**Особенности постоянной $\hbar$.** Первая особенность – это крайне малая величина. Степень $-34$ в системе единиц, так или иначе определяемой «человеческими» масштабами, есть некоторый рекорд. Практически это значит, что постоянная Планка существенна для микромира. Именно она определяет размеры атомов.

Вторая особенность – необычная размерность (Дж·с). Пока нам не приходилось умножать энергию на время. Впрочем, известная из механики величина – момент импульса – имеет как раз такую размерность. Так что можно ожидать, что в атоме характерный момент импульса будет порядка $\hbar$. Мы увидим, что в микромире важную роль играют произведения типа $px$ и $Et$. (В обычной жизни тоже можно перемножить импульс на длину, но это будет настолько большое количество элементарных единиц $\hbar$, вроде $10^{30}$, что такая дробность не имеет никакого значения. Аналогично мы не замечаем, что человек состоит из примерно такого же целого числа атомов). Вообще-то в классике есть величина размерности Дж·с, она называется действием. Есть принцип наименьшего действия, подобный принципу Ферма в оптике. Но эти вопросы выходят за рамки данного курса.

**Фотоэффект.** Планк был крайне осторожен, описывая свои результаты, и подчеркивал их формальный характер, почти как когда-то Коперник. Действительно, получа-

[2]Точнее, Планк ввел несколько другую постоянную $h = 2\pi\hbar = 6{,}626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с, так что энергия записывалась в стиле XIX века как $h\nu$.

лось неудобно. Световые волны, как бы эталон непрерывности, делились на частицы. Неожиданно идея квантов нашла подтверждение в теории фотоэффекта Эйнштейна.

Фотоэффект – это когда свет выбивает электроны из металла. Сейчас на основе фотоэффекта работает масса приборов (хотя бы пропускники в метро). Оказалось, что электроны вылетают хорошо при освещении коротковолновым светом. Если же светить длинноволновым, то даже при большой интенсивности никакого фотоэффекта нет. Для большинства материалов электроны не выбиваются красным светом (красная граница фотоэффекта). Этот удивительный факт оказался достаточен для Эйнштейна. Он попробовал буквально понять идею Планка и записать закон сохранения энергии:

$$\frac{mv_{max}^2}{2} = \hbar\omega - A\,.$$

Квант света с энергией $\hbar\omega$ попадает в металл и передает энергию электрону. Тот часть энергии тратит на преодоление работы выхода $A$ (для каждого металла своей), а остальное сохраняет в виде кинетической энергии. Если правая часть меньше нуля, то есть частота света мала, никаких электронов не вылетает, как ни свети[3]. Индекс $_{max}$ обозначает, что кинетическая энергия бывает и меньше, чем $\hbar\omega - A$. Энергии электронов в металле различны; работа $A$ необходима для выбивания самых энергичных «верхних» электронов, а для большинства, энергия которых ниже, нужна и бóльшая работа. Чаще попадаются электроны еще меньшей энергии, которых квант вообще не выбивает. Отношение числа электронов к числу фотонов (квантовый выход) меньше единицы, и прибор считается высокочувствительным при выходе 0,1 – 0,4. Милликен поставил точнейшие эксперименты (последние варианты установки напоминали механическую мастерскую в вакууме); все опыты отлично объяснялись этим простым уравнением. По наклону зависимости энергии от частоты можно независимо найти значение постоянной Планка. Оно совпадает с величиной, полученной из теплового излучения.

Следовательно, кванты света – фотоны – существуют **на самом деле**, а не как деталь формального описания излучения нагретых тел.

**Кванты – реальность.** Еще более наглядно квантовый характер света проявился в опытах со слабыми источниками. Оказалось, что при ослаблении светового потока датчики начинают «пищать» не непрерывно, а импульсами, соответствующими единичным фотонам. Человеческий глаз не реагирует на отдельные фотоны видимого света, но может уловить группу из десятка фотонов. Будь глаз человека на порядок чувствительнее, вопрос о природе света был бы ясен уже сотни тысяч лет. Интересно, что дискретность света ближе к нашему порогу ощущений, чем дискретность вещества[4].

Значит, свет – электромагнитная волна – чем-то похож на частицу. Позднее выяснилось, что и «натуральные» частицы, вроде электрона, тоже немного волны. Все это вместе теперь называется **квантами**. Фотон – квант света, электромагнитного поля. А электрон – квант такого лептонного поля.

---

[3]Изредка электрон успевает воспользоваться энергией второго «красного» кванта, пока не растерял энергию первого, и вылететь из металла. Но вероятность таких двухфотонных процессов очень мала.

[4]Некоторые ночные животные, например, лягушки, способны реагировать на отдельные кванты.

Планк получил Нобелевскую премию в 1918 г., Эйнштейн – в 1921 (причем в основном за фотоэффект, а не за теорию относительности).

## 5.2 Строение атома. Атомное ядро

Как мы помним, все состоит из атомов. Остается вопрос, как устроены сами атомы. К началу нашего века некоторые из деталей уже были известны. Электроны – переносчики тока – были обнаружены в свободном состоянии (так называемые катодные лучи, Дж. Дж. Томсон, 1897)[5]. По отклонению в магнитном поле выяснилось, что у них отрицательный заряд и очень малая масса (по сравнению с любым атомом). Поскольку атом нейтрален, должны присутствовать и положительные заряды. Исторический интерес представляет первая разумная модель атома, также изобретенная Дж. Дж. Томсоном (1903). Чтобы с чего-то начать, рассмотрим эту модель.

**Атом Томсона.** В таком атоме электроны сидят в потенциальной яме, образованной положительным зарядом. Скажем, атом водорода – это заряд (+e), размазанный равномерно по шару радиуса $a$ порядка $10^{-10}$ м. Внутри помещается точечный электрон. Он предпочитает находиться в центре, но если ему придать очень много энергии, он выскочит наружу и даже может улететь от своего плюса. Для этого требуется энергии порядка $e^2/(4\pi\varepsilon_0 a) = e\varphi$, где $\varphi \simeq e/(4\pi\varepsilon_0 a)$ – характерный потенциал внутри такого атома, порядка $9 \cdot 10^9 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}/10^{-10} \approx 14{,}4$ В. Энергия $e\varphi$ тогда будет около 14 эВ. По измерениям, потенциал ионизации водорода (13,6 эВ) очень близок к этой оценке. Для других атомов получится величина того же порядка. Единица эВ – электронвольт, как видно, характерна для атомного мира.

При меньшей избыточной энергии электрон может колебаться. Как мы помним, внутри равномерно заряженного шара электрическое поле растет линейно с радиусом $r$ : $E = er/(4\pi\varepsilon_0 a^3)$ (как и ускорение силы тяжести внутри однородной планеты). Сила $eE$ пропорциональна смещению, поэтому колебания электрона будут гармоническими, с частотой $\omega = \sqrt{e^2/(4\pi\varepsilon_0 m a^3)} \approx (1{,}6 \cdot 10^{-19}/10^{-10})/\sqrt{9 \cdot 10^9/(10^{-30} \cdot 10^{-10})} \approx 10^{16}$ 1/сек. Такой должна быть частота излучаемого атомом света. Это опять похоже на правду: длина волны $\lambda = 2\pi c/\omega \approx 200$ нм попадает в область ближнего ультрафиолета. Поскольку оценки довольно грубые, то можно ожидать оптических проявлений и в видимом свете.

Тем не менее, модель Томсона не годится. Один из основных ее недостатков – как раз жестко заданная частота излучения атома. Даже атом водорода излучает вовсе не одну линию. Наоборот, спектр его довольно сложен, хотя его удалось описать так

[5]Во избежание путаницы: Джозеф Джон Томсон (1856–1940, Нобелевская премия 1906) – младший однофамилец Уильяма Томсона (1824–1907, с 1892 за научные заслуги – барон Кельвин, под каковым именем он более известен). И Кельвин, и Дж. Дж. Томсон были президентами Лондонского Королевского общества (1890–1895 и 1915–1920 соответственно). Был еще Дж.П. Томсон (1892–1975), сын Дж.Дж., обнаруживший в 1927 г. дифракцию электронов независимо от К. Девиссона и Л. Джермера (Нобелевская премия 1937, совместно с К. Девиссоном).

называемыми сериальными формулами. К 1900 году число известных линий (частот) водорода насчитывалось десятками, а для других веществ – тысячами. Кроме того, оставался открытым вопрос, что удерживает положительный заряд от рассыпания.

**Радиоактивность.** В 1896 г. Беккерель открыл радиоактивность. Оказалось, что некоторые вещества испускают «лучи», которые классифицировали в три вида: $\alpha$, $\beta$, $\gamma$. Лучи $\alpha$ – частицы с массой 4 атомных единицы и зарядом 2. Это установлено по отклонению в магнитном поле – в камере Вильсона. Как теперь известно, это ядра гелия. Лучи $\beta$ отклоняются в другую сторону (то есть их заряд отрицательный) и оказались попросту энергичными электронами. Наконец, $\gamma$ не отклонялись магнитным полем и напоминали ранее открытые рентгеновские лучи. Как раз они в основном засвечивали фотопластинки Беккереля, даже помещенные в защитную оболочку. Характерная энергия лучей $E$ оказалась порядка **миллиона** электронвольт. Энергия оценивалась по кривизне траектории: радиус окружности $R = p/eB$. Импульс $\alpha$ – частицы $p = \sqrt{2mE}$, и $R = \sqrt{2mc^2E}/ecB$. Удобно считать в электронвольтах, учитывая, что энергия покоя протона и нейтрона около 940 МэВ: $R = \sqrt{2 \cdot 940 \cdot 1} \cdot 10^6/(3 \cdot 10^8 \cdot 10^{-1}) \simeq 1{,}4$ м при энергии $E = 1$ МэВ и магнитном поле 0,1 Тл $= 10^3$ эрстед. Для электронов из-за меньшей массы радиус получится порядка сантиметра. Такую кривизну нетрудно измерить, так что сомнений в величине энергии не было.

Энергия в диапазоне МэВ означает, что электрон или $\alpha$– частица перед вылетом разгонялись разностью потенциалов порядка $10^6$ вольт. Ясно, что в модели Томсона такая энергия ниоткуда не возьмется.

**Радий.** Невидимые лучи и почерневшие фотопластинки могут казаться далекими от практики. Но радиоактивность можно буквально пощупать. Радий (от лат. radius – лучистый) был открыт супругами Кюри как интенсивно излучающая примесь к урану. Радий и его соли светятся в темноте и заметно теплее окружающей среды. Грамм радия выделяет около 130 калорий в час, что достаточно для расплавления 1,6 г льда[6]. Что его нагревает? Стали сомневаться в законе сохранения энергии. Со временем выяснилось, что радий расходуется, хотя и медленно: период его полураспада около 1600 лет. Поэтому в течение года или десятка лет «на вид» с ним ничего не происходит. Но каждый распад высвобождает так много энергии, что препарат греется без видимых изменений в веществе. Сейчас из некоторых изотопов (как $^{238}$Pu) делают тепловые источники, например, для питания аппаратуры в многолетнем космическом полете.

**Структура атома.** Как «получить» из атома энергию побольше? Либо нужны взаимодействия другой природы, гораздо сильнее электрических, либо, раз электрическая энергия $e^2/(4\pi\varepsilon_0 a)$ мала, то надо уменьшить размер. Чтобы получить МэВ вместо 10 эВ, надо взять размер на 5 порядков меньше, то есть около $10^{-13}$ см или $10^{-15}$ м. Оставим обозначение $a$ для размера атома, а этот гипотетический малый размер будем обозначать $r$. Если в атоме есть настолько маленькие детали, в которых размещается заряд,

[6] Лучше, конечно, не трогать радий руками: смертельная доза радиоактивности соответствует поглощению $\simeq 1{,}5$ калории на килограмм веса организма. К настоящему времени добыто всего около килограмма радия; актуальность его сильно упала с появлением множества искусственных изотопов.

то из них вполне могут вылетать излучения нужных параметров.

Такие детали нашлись (это и есть ядро атома), но нашлись и другие взаимодействия (сильные и слабые). Например, $\beta$-лучи – продукт слабых взаимодействий, типа распада нейтрона. В начале века об этом думать было рано, и искали «электромагнитное» решение. По современным представлениям, $\alpha$–радиоактивность вызвана совместно сильным и электромагнитным взаимодействием, причем конечная энергия $\alpha$–частиц – это в основном результат электромагнитного (кулоновского) отталкивания их от ядра. $\gamma$–лучи сами имеют электромагнитную природу (энергичные фотоны), излучаются они в ядерных переходах, энергии которых определяются в основном сильным взаимодействием частиц в ядре. Найдено еще несколько (более редких) типов радиоактивности.

**Опыт Резерфорда.** В 1911 г. Э. Резерфорд открыл атомное ядро. Это – важнейшее экспериментальное открытие XX века. Исследовалось отклонение в веществе $\alpha$-частиц. Имеющие большую энергию $\alpha$-частицы использовались как снаряды, способные проникать в атомы. Поскольку $\alpha$-частицы заряжены, они сильно взаимодействуют с веществом и задерживаются в довольно тонких слоях. Поэтому в опыте Резерфорда частицы пропускались через тонкую золотую фольгу.

Ожидаемое отклонение частиц было небольшим. Если в атоме действуют поперечные силы порядка $F \sim e^2/(4\pi\varepsilon_0 a^2)$, то за время пролета $t = \Delta/V$ фольги толщиной $\Delta$ может набраться поперечная скорость $V_\perp = (F/m)t = e^2\Delta/(4\pi\varepsilon_0 a^2 V m)$. Угол отклонения

$$\theta \sim \frac{V_\perp}{V} = \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a m V^2}\right)\left(\frac{\Delta}{a}\right) .$$

Первый множитель – отношение характерной атомной единицы энергии $e^2/(4\pi\varepsilon_0 a)$ к кинетической энергии $\alpha$-частицы – это отклонение, набираемое на одном атоме. Второй – количество атомов на пути частицы. Получаем $\theta \sim (10/10^6)\cdot 10^4 = 0{,}1$ для слоя толщиной $10^4$ атомов (1 мкм). Это завышенная оценка. Правильнее считать, что не все атомы отклоняют в одну сторону, а скорее их воздействия случайны. Вместо $(\Delta/a)$ надо ставить $\sqrt{\Delta/a}$, как учит статистика, и реальное отклонение будет порядка $10^{-3}$.

**Атомное ядро.** Примерно такие отклонения и наблюдались. Однако Резерфорд предложил своим сотрудникам Гейгеру и Марсдену проверить, не будут ли, хотя бы изредка, происходить большие отклонения. И действительно, оказалось, что примерно одна частица из 10000 поворачивает на угол больше $90^\circ$. Хотя Резерфорд сравнивал такое событие с отражением артиллерийского снаряда от листка бумаги, догадаться о возможности больших отклонений можно было хотя бы из большой энергии $\alpha$-частиц. Они тоже вылетают из атомов, и должны откуда-то брать свои несколько МэВ. Значит, в атоме есть область, в которой действуют огромные силы. А поскольку большие отклонения редки, эта область очень маленькая. Ее и назвали **атомным ядром**.

Рассеяние на большие углы оказалось «кулоновским», то есть совпадающим с рассеянием на неподвижном точечном заряде $Ze$, где $Z$ – порядковый номер атома мишени (как известно сейчас, это число протонов в ядре). Эта задача решается точно ($\alpha$-частица летит по гиперболе), и надо только перевести эти траектории в отсчеты датчика (**резерфордовское сечение взаимодействия**). На больших углах воздействие атомных электронов несущественно из-за его слабости и компенсации вклада попутных атомов. Заряд ядра положительный, он компенсируется отрицательным зарядом $Z$ электронов.

Мы видим, что $\alpha$-частицы дали возможность зондировать атом с хорошим разрешением. Для энергии $E_\alpha = 1$ МэВ при отскоке назад минимальное сближение с рассеивающим центром, или ядром, $r$ найдем, сравнивая энергии: $2Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r) = E_\alpha$, то есть $r \sim 2Za \cdot (e^2/4\pi\varepsilon_0 a)/E_\alpha = 10^{-5} \cdot 2Za \simeq 10^{-15}$ м при небольших $Z$. Многочисленные эксперименты показали, что ядро имеет радиус примерно $10^{-15} \cdot A^{1/3}$ м, где $A$ – массовое число атома (атомный вес, то есть на современном языке сумма количеств протонов и нейтронов). Если атом увеличить до размера 1 км (на 18 порядков), то ядро будет по размеру как вишня для легких атомов ($10^{-13}$ см $\Rightarrow$ 1 см) или как большое яблоко ($10^{-12}$ см $\Rightarrow$ 10 см) для тяжелых. Сечение взаимодействия ядра с энергичными частицами удобно измерять в барнах ($10^{-24}$ см$^2$).

Таким образом, атом оказался совершенно не похож на томсоновскую модель. Практически вся его масса сосредоточена в очень маленьком ядре. Это объясняет, откуда берется огромная энергия при радиоактивности (хотя бы кулоновское отталкивание почему-либо оторвавшегося фрагмента ядра), но зато ставит новые вопросы.

## 5.3 Атом Бора

Первый из этих вопросов – как может быть устроен неоднородный атом? Мало кто способен вникнуть в данные по рассеянию $\alpha$-частиц. А вот если из них удастся получить удобопонятную модель атома, которую потом будут рисовать во всех учебниках, на значках и логотипах, то такой результат уже влияет на все общество.

**Модель Резерфорда–Бора.** Положительное ядро маленькое, значит размер атома обеспечивается отрицательными электронами. Ясно, что электроны не могут висеть неподвижно над притягивающим ядром. Модель Резерфорда – Бора использовала аналогию с Солнечной системой – электроны вроде планет, а ядро – как бы Солнце. Вращение вокруг ядра удерживает электроны на орбитах. Но отсюда возникают два новых вопроса:

1. Раз электрон летает вокруг ядра, он имеет ускорение. В отличие от планет, электрон заряжен и должен излучать энергию. Мощность излучения заряда $e$, имеющего ускорение $w$, можно оценить по размерности: $N \sim e^2 w^2/(4\pi\varepsilon_0 c^3)$. Потери на излучение приведут к гибели атома – падению электрона на ядро через некоторое время $t$. Оцениваем $Nt$ как $e^2/(4\pi\varepsilon_0 a)$, откуда $t \sim c^3/(w^2 a)$. Подставим $w = v^2/a$, где $a$ – размер атома: $t \sim (a/v)\cdot(c^3/v^3)$. Первый множитель – это время обращения электрона, а второй можно записать через отношение энергии покоя электрона 0,5 Мэв к энергии связи в атоме 10 эВ: $(mc^2/mv^2)^{3/2} \simeq (500000/10)^{3/2} \simeq 10^7$. Электрон успевает совершить много оборотов (падает весьма плавно), но из-за крайне

малого времени оборота ($10^{-16}$ с) должен упасть на ядро за время $t \sim 10^{-9}$ с. Тем не менее атомы, из которых состоим и мы, выглядят гораздо более стабильными[7].

2. Орбиты планет не заданы жестко. Если и найдут планетную систему, похожую на нашу, никто не ждет, что орбиты будут точно такими же. Скорее, будет вполне заметная разница. Для любого радиуса орбиты можно подобрать скорость обращения, и планета будет летать сколько угодно. А вот атомы (данного элемента, данного изотопа) **все одинаковы абсолютно**. Получается, что какая-то орбита выделена, и по ней-то электрон летает.

**Постулаты Бора.** Около 1913 года Нильс Бор довел «планетарную» модель до некоторой завершенности. Упомянутые трудности он разрешил, введя так называемые постулаты Бора:

- В атоме существуют стационарные состояния, в которых электрон не излучает.
- При переходе между состояниями излучается энергия, равная разности энергий состояний.

В какой-то степени можно объяснить, почему дела обстоят таким образом. Падение электрона, сопровождаемое излучением, процесс по атомным масштабам медленный (вспомним оценки частоты излучения – $10^{16}$ 1/с). Излучение мало-помалу невозможно, так как частота излучения какая-то определенная, значит энергия кванта тоже конечна. А половину или десятую часть кванта излучить нельзя. Поэтому электрон способен перескочить в состояние с заметно (на $\hbar\omega$) отличающейся энергией, но **не может** изменять энергию **непрерывно** и даже малыми дискретными порциями.

Вместо полного объяснения Бор скорее констатировал состояние дел. Это был разумный подход, так как до хорошего понимания устройства атома и вообще новой физики прошли десятилетия.

Но остается еще вопрос, как же найти «правильные» состояния? Для этого Бор предложил правило отбора:

- На стационарных орбитах момент импульса электрона равен $n\hbar$, где $n$ – целое число, $\hbar$ – постоянная Планка.

Так квантовая постоянная впервые была употреблена для выяснения устройства атома.

Мы увидим, что постулаты Бора в общем правильны. Этого нельзя сказать о правиле отбора (в частности, в основном состоянии, при котором энергия минимальна, момент импульса равен нулю, а не $\hbar$; вовсе не момент определяет энергию состояния в атоме водорода). Сейчас можно сказать, что основные заслуги Бора – это концентрация на эксперименте, а не дефектах теории (от него пошла развитая концепция наблюдаемости) и применение квантовой постоянной $\hbar$ к атому (хотя буквально и неправильное).

---

[7] Еще гораздо быстрее должен погибнуть сложный атом из-за взаимодействия электронов. В отличие от планетной системы, силы между электронами примерно такие же, как между электроном и ядром. Поэтому устойчивые орбиты (в рамках классической механики) уже в атоме гелия невозможны.

Удивительно, что, несмотря на такую ошибку, теория Бора позволила рассчитать размеры и свойства (то есть спектр) атома водорода в полном согласии с экспериментом. И сейчас физики для быстрого вычисления состояний применяют уравнения Бора.

**Расчет атома.** Покажем, как работают эти уравнения. На круговой орбите радиуса $a$

$$\frac{mv^2}{a} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a^2}\,, \quad mva = n\hbar\,.$$

Два неизвестных $a$ и $v$ отсюда находятся: $v = e^2/(4\pi\varepsilon_0 n\hbar)$, $a = (4\pi\varepsilon_0/me^2)\hbar^2 n^2$. Энергия электрона

$$E_n = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a} \equiv -\frac{mv^2}{2} \equiv -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot 2a} = -\frac{me^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}\,.$$

Минимальная энергия – при $n = 1$. Это состояние электрона называется **основным**. Для него $v = e^2/(4\pi\varepsilon_0\hbar)$, $a = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/me^2$, $E = -me^4/(2{\cdot}(4\pi\varepsilon_0\hbar)^2)$. Подставляя значения, имеем $a = 0{,}53 \cdot 10^{-10}$ м, $E = -2{,}2 \cdot 10^{-19}$ Дж $= -13{,}6$ эВ. Действительно, размер атома получился правильным. То же можно сказать и о энергии электрона, которую можно проверить по затратам на ионизацию атома.

Вспомнив постулаты Бора, найдем спектр водорода. Атом излучает при переходе электрона в состояние с меньшей энергией. Например, при падении с уровня n на нижний, первый уровень, энергия излучения $\hbar\omega_{n1} = E_n - E_1$ равна $13{,}6 \cdot (1 - 1/n^2) =$

10,2; 12,09; 12,75; 13,06; 13,22; 13,32;... эВ при $n = 2, 3, 4, 5, 6, 7...$

Действительно, у водорода есть такие линии в спектре, а вся последовательность называется серией Лаймана. Даже минимальная частота серии Лаймана попадает в ультрафиолетовую область (максимальная длина волны 1220 Å), так что эти линии не наблюдаются в видимом свете.

При падении на уровень 2 получим $\hbar\omega_{n2} = E_n - E_2$ : $13{,}6 \cdot (1/2^2 - 1/n^2) =$

1,89; 2,55; 2,86; 3,02; 3,12;... $\Rightarrow$ 3,4 эВ при $n = 3, 4, 5, 6, 7...$

Это – серия Бальмера. Заметная часть этой серии (простирающейся от 6560 до 3650 ангстрем) соответствует видимому свету, почему она и стала известна раньше. И снова получилось точное соответствие измерениям. Теория Бора, аккуратно предсказывающая такие замысловатые зависимости, заслужила Нобелевскую премию уже в 1922 г.

Нагретый газ излучает линии при падении электронов с верхних состояний на нижние. Наоборот, из нижнего состояния электрон может подняться на верхнее, поглотив соответствующий квант. Тогда будет наблюдаться спектр поглощения, подобный спектру испускания, но «негативный» – темные линии на светлом фоне. Его можно наблюдать, например, когда свет Солнца проходит через его верхнюю атмосферу, сравнительно холодную.

Остановимся еще на скорости электрона в атоме. В нижнем состоянии $v = e^2/(4\pi\varepsilon_0\hbar) = 2{,}2 \cdot 10^6$ м/с. Полезно записать $v$ в виде $v = c \cdot e^2/(4\pi\varepsilon_0\hbar c) = c \cdot (1/137)$. Видно, что электрон нерелятивистский. Безразмерная величина $e^2/(4\pi\varepsilon_0\hbar c)$ называется постоянной тонкой структуры. Удивительно, что ее обратная величина – почти целое число: 137,036...

С ростом $n$ атом увеличивается в размерах, энергия электрона стремится к нулю (снизу), скорость замедляется. Из космоса к нам иногда приходят кванты «света» от атомов водорода, у которых радиус орбиты чуть ли не в сантиметр. В земных условиях, разумеется, такой атом долго не протянет.

**Условия квантования Бора–Зоммерфельда.** Позднее, в 1914 г., Зоммерфельд рассмотрел эллиптические орбиты. Эллипс задается двумя параметрами, например энергией и моментом импульса. Значит, надо два условия типа боровских – на радиальное и угловое движение.

Вращение, конечно, снова задается моментом $L$. Но радиальное движение нельзя задать, скажем, импульсом $p_r$, так как он колеблется. Обобщение Зоммерфельда выглядит так:

$$\oint L d\varphi = 2\pi l\hbar, \quad \oint p_r dr = 2\pi n_r\hbar \quad (l, n_r - \text{целые})\,.$$

Первый интеграл, так как $L$ сохраняется, эквивалентен равенству $L = l\hbar$. Второй уже нетривиален; применение его к атомным орбитам изложено в Приложении 1. Подобные интегралы от импульса по соответствующей координате, взятые по периоду движения, уже были известны физикам – это так называемые адиабатические инварианты. В таком виде условия квантования годятся для любого периодического движения.

**Квантование осциллятора.** Покажем работу условий квантования на примере осциллятора – массы на пружинке. Интеграл Зоммерфельда будет

$$\oint p\,dx = \oint mv\,dx = \int\limits_T mv\frac{dx}{dt}\,dt = 2\int\limits_T \frac{mv^2}{2}\,dt = 2T\left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle,$$

где $T$ – период колебаний. Так как при классическом движении средняя за период кинетическая энергия равна половине энергии колебаний $E$, получаем

$$\oint p\,dx = ET = 2\pi n\hbar\,,$$

так что уровни энергии в параболической потенциальной яме: $E_n = n\hbar\omega$. Как говорят, колебательные уровни **эквидистантны** – соседние отличаются друг от друга на одинаковую ступеньку $\hbar\omega$. При переходе с любого уровня на ближайший нижележащий эта разность излучается в виде кванта света той же частоты $\omega$; с этих квантов мы и начали рассмотрение микромира. Колеблющаяся молекула в принципе способна излучать кванты, соответствующие перескоку с данного уровня на любой нижележащий. Но переходы на отдаленные уровни, для которых энергия кванта была бы $2\hbar\omega$, $3\hbar\omega$..., происходят крайне редко (как говорят, они «запрещены»), а типичны переходы между соседними уровнями. Поэтому в спектре каждое колебание дает одну-единственную линию, а не «гребенку», что и облегчает анализ колебательных спектров[8].

Точное решение задачи об осцилляторе дает $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. Поправку $1/2$ мы обсудим ниже. Можно сказать, что условия Бора-Зоммерфельда тем точнее, чем больше номер состояния $n$.

[8]Гребенки в спектрах тоже бывают, но они получаются из-за вращательных переходов (вращательные уровни не эквидистантны).

## 5.4 Волны де Бройля. Принцип неопределенности Гейзенберга

Схема Бора явно противоречива. Следующий решающий сдвиг в умах произвел Луи де Бройль в 1923 г.

**Волны де Бройля.** Раз Планк и Эйнштейн не побоялись приписать свету дискретность, свойственную частицам, хотя бы пулям или крупинкам соли, то де Бройль решил, что возможно и обратное: частицы имеют волновые свойства. Будем исходить из аналогии. Известно, что для света $E = \hbar\omega$, а $\omega = 2\pi c/\lambda$. В то же время для света из теории относительности $E = pc$. Тогда импульс светового кванта $p$ можно связать с длиной волны: $p = 2\pi\hbar/\lambda$. Но это выражение не содержит никаких следов того, что дело идет о свете: здесь выпала скорость света $c$. Почему бы не выполняться тому же и для электрона: $\lambda = 2\pi\hbar/p = 2\pi\hbar/mv$? Оценим характерную длину волны. Кинетическая энергия электрона в атоме водорода $p^2/2m = 13{,}6$ эВ. Тогда $p = \sqrt{2 \cdot 13{,}6 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19} \cdot 9 \cdot 10^{-31}} \approx 2 \cdot 10^{-24}$; $\lambda \approx 3 \cdot 10^{-10}$ м. Выходит близко к атомным размерам. Если еще вспомнить, что сама $\lambda$ – величина не очень характерная, а более интересна $\lambda/2\pi \approx 0{,}5 \cdot 10^{-10}$ м, то это попросту боровский радиус атома!

**Эксперимент Девиссона и Джермера.** Проверить, правда ли электрон – волна, можно в дифракционных экспериментах. В 1927 г. Девиссон и Джермер поставили опыт, в котором пучок электронов отражался от поверхности металла. При энергии в десятки эВ длина волны порядка межатомных расстояний, так что металл работает как отражательная дифракционная решетка. Оказалось, что электроны успешно дифрагируют, и кроме главного «зеркального» максимума наблюдаются боковые в полном соответствии с формулами де Бройля. В том же году Дж.П. Томсон получил дифракцию электронов на тонкой металлической фольге.

Позднее волновые свойства прямо наблюдались и у атомов (главным образом легких – водорода и гелия). Чем тяжелее атом, тем короче его длина волны при данной скорости или энергии, тем труднее ее измерить. Мы с вами тоже имеем волновые свойства, но на человеческих масштабах их трудно заметить, так как длины волн будут крайне малы ($10^{-34}$ м при импульсе 1 кг·м/с).

**Стационарные состояния.** В духе концепции Де Бройля можно вернуться к истолкованию правила квантования Бора. Среди всех возможных орбит особенно важны те, на которых длина волны укладывается целое число раз. Тогда, повернув атом на $2\pi$, мы не получим никаких изменений. Можно сказать, что на такой орбите электрон «интерферирует сам с собой».

Это и есть стационарные состояния. Представим себе электрон на круговой орбите радиуса $a$. Чтобы на ней хорошо умещалась волна, должно выполняться равенство $2\pi a = n\lambda$, или $pa = n\hbar$. По форме это не отличается от исходного правила Бора, так что ничего пересчитывать не надо. Но смысл совершенно другой: $n$ это не величина момента импульса в единицах $\hbar$, а число волн, укладывающихся на орбите.

Поэтому электрон и не падает на ядро. Волна не может стянуться в точку. Хотя бы одна длина волны должна размещаться на самой нижней орбите. Волновая природа электрона объясняет также одинаковость атомов. Заметим, что и «пространственность» атома теперь можно понять лучше. Волна имеет протяженность во всех направлениях, и если мы еще рассуждали здесь о плоских орбитах, то больше по инерции. Но правда и то, что эти объяснения все еще слишком приблизительны.

**Принцип неопределенности.** Волновые представления привели Гейзенберга к формулировке принципа неопределенности (1927). Именно, к электрону неприменимо понятие траектории. И действительно, какая может быть траектория у волны? Если мы хотим точно задать импульс электрона, это потребует точного задания его длины волны, т.е. волна должна содержать много периодов. Но тогда координата электрона определена очень плохо. Получается, что электрон не может иметь одновременно точно определенные значения координаты и импульса.

**Соотношение неопределенностей** Гейзенберга выражает эту невозможность количественно. Пусть плоская волна (все равно, свет или электроны), распространяется в направлении $x$. Монохроматическая волна вовсе не локализована в пространстве, поэтому рассматриваем волновой пакет, составленный из волн с немного различающимися волновыми числами: в интервале порядка $\Delta k$ возле среднего значения $k$. Импульс монохроматической волны $p = 2\pi\hbar/\lambda = \hbar k$. Тогда импульс пакета имеет неопределенность $\Delta p_x \simeq \hbar\Delta k$. В п. 2.1 мы видели, что неопределенность $x$ – компоненты пакета, то есть его ширина $\Delta x$, порядка $1/\Delta k$. Из очевидного соотношения $\Delta k \cdot \Delta x \sim 1$, если де Бройль прав, следует

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \sim \hbar\,. \tag{5.1}$$

Пропустим волну через щель в экране шириной $d$. Как и в оптике, после экрана получится пучок, расходящийся под углом $\lambda/d \sim \hbar/pd$. Этот же угол можно записать как $p_y/p$, то есть в расходящемся пучке появляется поперечный импульс, по порядку величины равный $p_y = \hbar/d$. Одни электроны попадут в экран примерно напротив щели, другие отклонятся вверх или вниз. Так как пучок расходится симметрично, значит для него теперь характерна неопределенность поперечного импульса $\Delta p_y \sim \hbar/d$.

Пропуская электрон через щель, мы «измерили» его поперечную координату с точностью $d$, то есть неопределенность положения стала $\Delta y = d$. Отсюда имеем оценку неопределенности, совпадающую с (5.1): $\Delta p_y \cdot \Delta y \sim \hbar$.

Получается, что у электрона нельзя одновременно задать координату и соответствующий ей импульс. Если фиксировать координату, например, пропуская его через узкую щель, неизбежно «разбегается» импульс поперек этой щели. Если фиксировать электрон в точке (другими словами, точно измерить координаты), импульс его станет полностью неопределенным. Это – следствие волновой природы электрона, общее для всех волн. Электрон не имеет траектории (для построения которой необходимо в каждый момент знать и координаты, и все компоненты импульса).

Но ведь в камере Вильсона электрон оставляет явственный след, искривление которого в магнитном поле – стандартный способ измерения скорости и импульса? Опять дело в чрезвычайной малости постоянной Планка. Если толщина следа электрона (цепочки капель воды) 1 мкм $= 10^{-6}$ м, то $\Delta p \sim 10^{-34}/10^{-6} = 10^{-28}$ в СИ. Импульс же в продольном направлении при энергии 1 МэВ $p \sim \sqrt{2mE} = \sqrt{2 \cdot 0{,}9 \cdot 10^{-30} \cdot 10^{6} \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}} \simeq 5 \cdot 10^{-22}$ на 6–7 порядков больше. Поэтому траектория как бы и есть, пока она достаточно «толстая». Но если переходить к истинно малым (для такой энергии – ядерным) масштабам, от траектории ничего не останется.

Поучительно применение соотношения неопределенностей к оценке размера атома. Поскольку электрон локализован внутри атома, для него искомый размер $a$ есть неопределенность координаты. Тогда электрон должен иметь неопределенность импульса $\delta p \sim \hbar/a$. Энергия атома будет

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a}\,.$$

При малых $a$ преобладает первое, положительное слагаемое; при больших – второе, отрицательное. Найдем размер $a$, отвечающий минимальному значению энергии: $dE/da = -\hbar^2/ma^3 + e^2/(4\pi\varepsilon_0 a^2) = 0$, откуда $a \sim 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(me^2)$! Получается то же самое значение: 0,5 ангстрема. Польза от нового «вывода» та, что здесь ни о каких орбитах не было и речи: сразу видно, что размеры атома одинаковы во всех измерениях. Основное состояние атома водорода сферически симметрично.

**Волны или частицы?** Трудно преодолеть прочно усвоенные догмы, вроде того, что электрон – это маленький твердый шарик. Но это надо сделать тому, кто хочет понимать, как устроена природа. Например, в дифракционном опыте электроны попадают, конечно, в определенные места экрана, то есть на каждый электрон отзывается определенный маленький датчик. В этом смысле электрон – частица, неделимый квант. Но в разные места попадать они будут с разной частотой, точно соответствующей распределению интенсивности дифрагирующей волны. И такое распределение интенсивности сохраняется, даже если электроны заведомо летят поодиночке, например, попадая на экран раз в секунду. Значит, электрон все же волна. То же верно для света (фотонов), нейтронов и пр.

Такое свойство назвали **корпускулярно-волновой дуализм**. Упрощенно говоря, электроны – и волны, и частицы одновременно. Для облегчения восприятия этой противоречивой (с точки зрения макроскопического опыта) ситуации можно рекомендовать следующую картину мира[9]:

1. Существуют только волны различной природы (свет, электроны и т.п.) Никаких частиц не бывает. Те песчинки, пули и планеты, с которыми мы привыкли иметь дело, тоже волны. Но они размазываются крайне слабо, и мы не замечаем у них волновых свойств. Наша неспособность заметить дифракцию пуль, вылетающих из автомата, и есть основание для возникновения концепции частицы – чего-то, что занимает пространство и летит по определенной траектории.

[9]Конечно, не единственно возможную. См. примечание на стр. 84 и Приложение 2.

2. Но все существующие волны – квантовые. Они поглощаются, отражаются, рассеиваются, и т.п. исключительно поштучно, индивидуально. Во вспышке света частоты $\omega$ может быть пять или семь таких порций – квантов с энергией $\hbar\omega$ каждый, но никогда не 5 целых и 7 десятых. У некоторых квантов есть и другие отличительные признаки (кроме единичности), как заряд или масса у электрона, которых фотон не имеет, но это не «основа», а как бы отличительная раскраска.

В отличие от «частиц» типа камешка или пылинки, электрон нельзя разрезать на куски. Уже это показывает, что квант и частица не одно и то же. Люди изобрели понятие частицы, отправляясь вовсе не от электронов, но от макроскопических тел, размеры которых не существенны в данной задаче. И хотя пули тоже попадают в мишень по одной целой штуке, вполне возможно это нарушить (скажем, разрезать их в полете лучом лазера). Значит, то, что есть общего у квантов и пуль – это скорее случайные и второстепенные признаки. Поэтому проще признать, что частицы – это антропоморфизм. В микромире их попросту нет. Есть квантованные волны. Из комплексов таких волн (атомов) построено вещество.

И все же электроны и протоны принято называть частицами. Нет смысла плыть против течения, но надо понимать условность терминологии и признать, что это слово в применении к электрону значит совсем другое, чем в бытовой речи.

Кроме того, одно дело – принципиальность, другое – практика. Массу задач можно решить, не задумываясь о волновых свойствах электрона и даже представляя его себе блестящим шариком. И раз задача облегчается, надо этим пользоваться, вспоминая о длине волны там, где она реально нужна.

**Парадокс дифракции.** Дифракция электрона на двух щелях совершенно подобна оптической, то есть на экране электронный пучок даст «забор» интерференционных полос. В минимумах засветки интенсивность нулевая, туда электроны не попадают. Но если закрыть любую из щелей, бывшие минимумы оказываются «освещены», туда начинают прилетать электроны! Это ясно показывает, что электрон взаимодействует с обеими щелями, а не ограничивается пролетом через какую-то одну. Открываем снова щель, чтобы дать ему дополнительную возможность достичь экрана, а он отвечает черной неблагодарностью и вообще перестает в какое-то место попадать.

Уже в обычной оптике такое явление удивительно. Но там мы могли сослаться на взаимодействие волн, прошедших различные щели (принцип Гюйгенса). В микрофизике положение еще поразительнее тем, что электроны (как и фотоны и пр.) дискретны и даже отдельный электрон дифрагирует. Можно запускать их по штуке, и они со временем нарисуют ту же самую картину. При этом, конечно, каждый электрон делает не весь забор, а маленькое пятно, например, микронных размеров. Наложение же всех пятен, когда набирается статистика, и будет дифракционной картиной.

Как же может электрон взаимодействовать сам с собой? Никак: по современным представлениям, интерферируют не куски электрона, а пути, возможности его движения (скажем, пути через две щели). Очень грубая аналогия – «разумный» электрон, который «ощупывает» пространство перед собой, прикидывает «экономические» затраты для каждого пути (вроде $S = \int p dx$), записывает амплитуды вида $\exp(iS/\hbar)$, суммирует эти экспоненты для всех путей, находит квадрат модуля суммы, разыгрывает точку финиша в соответствии с величиной этого квадрата модуля и приходит в такую случайно выбранную, но зависящую от взаимодействия всех потенциальных затрат точку. То же делает фотон; $S = \int p dx$ – это что-то вроде $x/\lambda$, и мы узнаём принцип Ферма: когда по близким путям фазы одинаковы, эти места и называются «луч света»[10].

## 5.5 Понятие о квантовой механике. Волновая функция

Де Бройль в своей гипотезе исходил не только из формальной симметрии, но и из спектра атомов. Он отмечал, что в физике известен только один класс явлений, для которого характерен дискретный спектр, а именно волны. Простейшие примеры такого рода – колебания струны, закрепленной в двух точках, колебания столба воздуха в духовых инструментах и т.д.

Когда работа де Бройля стала обсуждаться, в Цюрихе П. Дебай поручил своему ассистенту Э. Шрёдингеру рассказать о ней студентам и сотрудникам университета. В результате Шредингер, пытаясь понять работу сам, ухитрился придать четкий смысл качественным идеям де Бройля.

**Волновая функция.** Раз электрон – волна, он должен описываться чем-то непрерывным в пространстве. Волны на воде задаются высотой $h(x,t)$; электромагнитные волны – компонентами полей $E$ и $H$. То, что «волнуется» у электрона, Шредингер назвал волновой функцией и обозначил буквой $\Psi$; сейчас употребляется также название «амплитуда». Ее физический смысл стал ясен несколько позже.

Волновые процессы подчиняются дифференциальным уравнениям. Подход де Бройля, с его длиной волны, явно недостаточен: ведь длина волны $\lambda = 2\pi\hbar/p$ определена хорошо только для свободного движения, когда импульс $p$ фиксирован. Если же $\lambda$ сколько-нибудь меняется с координатой (из-за изменения импульса при движении в поле), то в этой самой степени теряет смысл.

**Импульс и энергия в квантовой механике.** Начнем со свободного движения, пытаясь получить нечто, пригодное для более общего случая. Естественно связать свободное движение с плоской волной: $\Psi \sim \exp(ikx - i\omega t) = \exp(2\pi i x/\lambda - i\omega t)$. Импульс электрона с длиной волны $\lambda$ равен $p_x = 2\pi\hbar/\lambda = \hbar k$. Поэтому $\Psi \sim \exp(ip_x x/\hbar - i\omega t)$. «Вытащить» импульс из этой формулы можно, взяв производную: $p_x\Psi = -i\hbar \cdot \partial\Psi/\partial x$. Производную можно вычислять уже не только от функции, описывающей плоскую волну. Поэтому

[10]Концепцию разумного электрона (без кавычек, в буквальном смысле) отстаивает Р.С. Нахмансон. См. УФН, 2001. Т. 171, №4, стр. 441. Насколько известно, он – единственный приверженец своей теории.

можно предположить, что выражения

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\,, \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\,, \quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\,, \quad \text{или} \quad \hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla \tag{5.2}$$

верны всегда, а не только для плоской волны. (5.2) заменяет дебройлевскую связь импульса и длины волны. Чтобы найти импульс, надо подействовать на волновую функцию **оператором** $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$. Шляпка над буквой напоминает, что оператор – это нечто более сложное, чем число.

Аналогично полагаем, что энергия кванта $E = \hbar\omega$ не только для световых волн, а и всех прочих. Тогда плоская волна $\Psi \sim \exp(ikx - i\omega t) = \exp(2\pi ix/\lambda - iEt/\hbar)$. Отсюда находим правило извлечения $E$:

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

**Уравнение Шредингера.** В свободном полете кинетическая энергия электрона постоянна: $p^2/2m = E$. Это тождество можно теперь записать в виде уравнения:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = E\Psi\,.$$

Если электрон движется в поле с потенциальной энергией $U$, и в трех измерениях, естественным обобщением будет

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\Psi + U\Psi = E\Psi\,, \quad \text{где} \;\; \triangle\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\,. \tag{5.3}$$

Это уже нетривиальное дифференциальное уравнение. По имени автора оно называется **уравнением Шредингера** (в данном случае – стационарным).

Стационарность (постоянство энергии электрона $E$) может не соблюдаться. Нестационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\Psi + U\Psi\,. \tag{5.4}$$

Стационарный случай соответствует специальной зависимости волновой функции от времени: $\Psi(x)\cdot\exp(-iEt/\hbar)$. Подстановка этого выражения в (5.4) дает стационарное уравнение (5.3).

**Прямоугольный колодец.** Покажем, как решается стационарное уравнение Шредингера, на простейшем примере. Пусть электрон сидит в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, так что $U(x) = 0$ при $0 < x < a$, и $U(x) = \infty$ при $x < 0$ и при $x > a$. Тогда внутри ямы выполняется уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = E\Psi\,.$$

Его решения – это попросту $\sin(kx)$ либо $\cos(kx)$, с любым $k$. Задавая $k$, мы тем самым определим энергию $E$.

Но не все решения годятся. Вряд ли волновая функция (как-то описывающая электрон) может существовать в областях, где потенциальная энергия бесконечна. Подходят те решения, которые обращаются в нуль на стенках ямы, а именно $\Psi = \sin(\pi n x/a)$, где $n$ – целое число. Подставляя в уравнение, получаем $E = \pi^2\hbar^2 n^2/2ma^2$. Только при таких выделенных значениях энергии получается разумное решение. Значит, дискретный спектр – следствие граничных условий. Точно так же закрепленная в двух точках струна имеет дискретный спектр собственных колебаний.

**Осциллятор – основное состояние.** Более сложный пример – уравнение Шредингера для осциллятора:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{kx^2}{2}\cdot\Psi = E\Psi\,.$$

Найдем решение для нижнего состояния. Ясно, что волновая функция должна убывать с удалением от начала координат, причем симметрично. Если попробовать решение вида $\Psi \sim \exp(-\beta x^2)$, то получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot 4\beta^2 x^2 exp(-\beta x^2) + \frac{\hbar^2}{2m}\cdot 2\beta\exp(-\beta x^2) + \frac{kx^2}{2}\cdot\exp(-\beta x^2) = E\exp(-\beta x^2)\,.$$

На $\exp(-\beta x^2)$ можно сократить. Равенство

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot 4\beta^2 x^2 + \frac{\hbar^2}{2m}\cdot 2\beta + \frac{kx^2}{2} = E$$

выполняется всегда (что и нужно от решения) при взаимном сокращении двух постоянных слагаемых и двух, содержащих $x^2$, то есть $\beta = \sqrt{km}/2\hbar$, $E = \hbar\sqrt{k/m}/2 = \hbar\omega/2$. Этим подтверждается поправка к условиям квантования Зоммерфельда – Бора. Найденное решение называют «нулевым колебанием», его энергия – наименьшая возможная для колебательной системы. Точный нуль запрещен принципом неопределенности: нельзя поместить массу в начало координат и одновременно задать ей нулевой импульс.

Следующие функции имеют вид полиномов, попеременно с нечетными и четными степенями $x$, умноженных на ту же $\exp(-\beta x^2)$, причем первый следующий уровень соответствует полиному первой степени и т.д. Эквидистантность уровней, хотя довольно сложно, но тоже доказывается (см. Приложение 3).

*Задача.* Найдите уровни энергии для $\Psi \sim x\cdot\exp(-\beta x^2)$ и $\Psi \sim (x^2 - b)\cdot\exp(-\beta x^2)$; во втором случае еще надо найти подходящее значение $b$. Показать, что $\beta$ для этих уровней то же, что и для основного состояния.

**Суперпозиции состояний.** Можно сложить две волновые функции с разными значениями энергии, при желании умножив их на коэффициенты, например:

$$\Psi = \exp(-\beta x^2/2)\exp(-i\omega t/2) + \sqrt{\beta}x\exp(-\beta x^2/2)\exp(-3i\omega t/2)\,.$$

Такая функция – тоже решение нестационарного уравнения Шредингера, следовательно, осциллятор может находиться и в таком состоянии – суперпозиции двух стационарных. Но в этом состоянии не определена энергия: при измерениях мы будем получать $\hbar\omega/2$ либо $3\hbar\omega/2$, с вероятностями (в этом примере) $2/3$ и $1/3$. Средняя энергия будет равна $5\hbar\omega/6$, однако именно такое значение не удастся получить ни разу.

Волновые функции с определенными значениями энергии аналогичны единичным векторам в некоем, так называемом гильбертовом, пространстве (имеющем бесконечное число измерений, соответственно бесконечному числу уровней энергии); тогда суперпозиция похожа на разложение произвольного вектора по компонентам. После измерения вектор состояния всегда «смотрит» точно вдоль какой-то оси: получается энергия какого-то определенного уровня, хотя заранее неизвестно, какого. Вторичное измерение всегда даст уже именно эту энергию. Можно складывать состояния с различными моментами импульса, импульсами и пр., как бы используя разные системы координат. Например, при прохождении плоской волны через щель в экране шириной $d$ из состояния с нулевым поперечным импульсом приготавливается сумма (суперпозиция) состояний с различными значениями поперечного импульса, лежащими в интервале около $\hbar/d$, или, что то же, выйдет набор плоских волн, отклоненных на углы в пределах $\lambda/d$. Хотя это новое состояние известно с максимально возможной определенностью, места попадания в экран будут случайными. Таким образом, источник квантовой случайности – перемешивание нескольких или многих состояний, каждое из которых имеет вполне определенное значение измеряемого параметра.

**Интерпретация волновой функции.** Очевидна трудность согласования размазанной в пространстве волны и точечности электрона (попадающего целиком в детектор, даже и маленький). Физический смысл функции $\Psi$ установил М. Борн. Сначала скажем (нестрого), что квадрат модуля $\Psi$ представляет собой вероятность найти электрон в единице объема в данном месте. Например, для прямоугольного колодца эта вероятность пропорциональна $\sin^2(\pi nx/a)$ для состояния с номером $n$. В атоме вероятность экспоненциально убывает с радиусом. «Размер» атома – это расстояние, на котором заметно убывает вероятность находиться электрону (как говорят, электронная плотность).

Иногда волновую функцию трактуют слишком примитивно, говоря, что $\Psi^2\Delta V$ есть вероятность «поймать» электрон в объеме $\Delta V$. Это не совсем так. Если мы возьмем кубическую «мышеловку» объема $L^3$ и запрем там электрон, принадлежащий атому водорода, то при $L \le a$ мы совершенно исказим условия, в которых находится электрон. Стенки – это тоже потенциальная яма, которая влияет одновременно с протоном! Например, если электрон пойман далеко от ядра, его потенциальная энергия, очевидно, мала. Кинетическая же энергия всегда положительна. Ясно, что их сумма никак не получится равной большой отрицательной энергии основного состояния ($-13{,}6$ эВ).

Ответ в том, что электрон, ограниченный стенками, приобретает добавочную неопределенность импульса и, значит, дополнительную кинетическую энергию. Складываясь с формально отрицательной кинетической энергией вдали от ядра, эта добавка и дает примерно нуль. К подобной поимке электрона сводится по существу любое измерение его координат. Видно, что квантовое измерение – совсем не то, что классическое. При измерении состояние разрушается, и чем точнее измерение, тем разительнее «порча» исходного состояния. Если с нашими грубыми инструментами лезть в атом, он наверняка сломается. Особую роль измерения в мире квантов первым осознал Н. Бор.

Правильный смысл $\Psi^2\Delta V$ – это не вероятность обнаружить электрон, а вероятность электрону находиться в данном объеме (при условии, что мы не пытаемся это проверить, зачерпывая его каким-то ведром). С помощью распределения вероятности можно считать различные средние, например:

$$\langle U \rangle = \int |\Psi|^2 U \cdot dV \,.$$

Переход от волновой функции к наблюдаемым величинам обычно и состоит в расчете средних значений.

## Приложение 1. Теория Зоммерфельда

Запишем уравнения Зоммерфельда:

$$\oint L d\varphi = 2\pi l \hbar, \quad \oint p_r dr = 2\pi n_r \hbar \quad (l, n_r - \text{целые})\,.$$

Первый интеграл, так как $L$ сохраняется, эквивалентен условию $L = l\hbar$. Второй для заданной эллиптической орбиты вычисляется (попробуйте сами): $2\pi L(1/\sqrt{1-\varepsilon^2} - 1) = 2\pi n_r \hbar$, где $\varepsilon$ – эксцентриситет орбиты. Из решения кеплеровой задачи $\varepsilon = \sqrt{1 + 2E(4\pi\varepsilon_0 L)^2/(me^4)}$. Отсюда следует

$$E = -\frac{me^4}{2(4\pi\varepsilon_0\hbar)^2} \cdot \frac{1}{(n_r + l)^2}\,.$$

Значит, энергия состояния определяется суммой $n = n_r + l$. В простейшей теории Бора $n_r = 0$, $l = n$. Но и в общем случае зависимость от $n$ точно такая же, как у Бора. Новое – в том, что состояний с одинаковой энергией несколько. Например, при $n = 2$ может быть ($n_r = 0$, $l = 2$) и ($n_r = 1$, $l = 1$).

Далее Зоммерфельд показал, что с учетом малых релятивистских поправок энергии состояний с данным $n$ начинают слегка различаться (как говорят, уровень расщепляется). Расщепление по порядку величины получилось близким к тому, что наблюдалось в спектрах.

Теория Зоммерфельда буквально так же неверна, как боровская. Неправильно то, что электрон не летает по эллипсу (да и по кругу). Ведь тогда атом был бы плоским. Жидкий водород имел бы огромную плотность. А на самом деле его плотность говорит о том, что атомы – скорее шары, чем тонкие диски.

Но имеется и рациональное зерно: условия квантования Бора–Зоммерфельда есть разумное приближение. На этих идеях была основана «старая» квантовая механика (примерно до 1925 г.)

## Приложение 2. Другие интерпретации квантовой механики.

Более или менее последовательная «волновая» идеология, изложенная в конце п. 5.4 (стр. 82 и далее) – не единственно возможная. Многие придерживаются традиционной точки зрения, по которой существуют **только частицы** (электроны, фотоны и пр.). Сами они никакие не волны. Волновому уравнению Шредингера подчиняется не электрон, а всего лишь его волновая функция, которая к самой частице имеет косвенное отношение. Такой подход, разумеется, возможен, но в его рамках трудно понять, почему электроны дифрагируют (управляются волновой функцией): это их свойство выглядит случайным и навязанным извне.

В последнее время стала популярна **многомировая** интерпретация квантовой механики. Считают, что реальность состоит из бесконечного числа миров, из коих наше сознание в каждый момент воспринимает только один. Всякое событие с несколькими возможными исходами (грубо говоря, бросание игральной кости) порождает «вилку», в которой данный мир размножается. (Не очень ясно, растет ли при этом число миров, или вилка приводит в уже существующие; но если и растет, при бесконечном числе это не страшно). Мы видим один исход, то есть выбираем дорогу в один из возможных миров. Поскольку Вселенная в обычном понимании по-английски – **universe**, полный набор миров называется **мультиверс**, это как бы ВСЕЛЕННАЯ со всеми большими буквами. В каждом мире электрон попадает в разные места экрана, но больше имеется таких миров, где точки попадания недалеки от мест, в которых уравнение Шредингера предсказывает максимум. Естественно, мы в ходе опыта чаще попадаем именно в такие миры, отчего и наблюдаем обыкновенно более вероятные исходы.

Некоторые полагают, что такие взгляды помогают лучше понять новые направления физики, в частности, работу квантовых компьютеров (каковые должны оперировать с **кубитами (quantum bit)** – очень сложными смешанными, **запутанными** состояниями как бы «сразу во многих мирах»). Здесь уже просматривается практическая ценность: имея квантовый компьютер, можно будет легко раскалывать применяемые сейчас шифры, основанные на разложении больших чисел на множители. В некотором смысле, уже сегодня все сообщения не защищены от дешифровки, надо только их записывать в ожидании появления квантовых компьютеров.

Многомировая теория вполне последовательна, и даже выпячивание субъективного фактора сознания ей как будто не вредит. Сейчас обсуждаются (уже выходящие за рамки физики) возможности влияния сознания на ход событий в желаемом, по крайней мере для носителя сознания, направлении. Хотя вызывает некоторое неудобство бесконечность миров (и где они помещаются?), зато сознание и мышление как будто находят свое место (в традиционной системе взглядов совершенно непонятно, зачем они нужны в природе). Интересно еще, что многомировая концепция легко справляется с известными парадоксами путешествий во времени. Подробнее с этими увлекательными вопросами можно познакомиться по статье: Менский М.Б. Квантовая механика: новые эксперименты, новые приложения и новые формулировки старых вопросов // Успехи физических наук, 2000. Т. 170, №6. С. 631–648. См. также последующую дискуссию (УФН, 2001. Т. 171, №4) и книги: Менский М.Б. Человек и квантовый мир. Фрязино: Век-2, 2005. 320 с.; Дойч Д. Структура реальности. Москва – Ижевск: РХД, 2001. 400 с. Предупредим, что на данный момент большинство физиков считает такие построения чистой фантастикой.

# Приложение 3. Спектр осциллятора

Найдем всю лестницу уровней осциллятора. Для краткости будем считать $\hbar = m = k = 1$, что означает переход к некоторой системе единиц, удобной для данного случая (например, если осциллятор – молекула, то масштабы близки к атомным). Тогда уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{x^2}{2}\cdot\Psi = E\Psi\,,$$

а в основном состоянии

$$\Psi_0 = \exp(-x^2/2)\,; \quad E_0 = 1/2\,.$$

Заметим, что основную функцию можно записать в виде $\Psi_0 = \exp(x^2/2)\cdot\exp(-x^2)$ с тем же успехом. Попробуем искать решение, записав произвольное состояние как

$$\Psi_n = \exp(x^2/2)\cdot\Phi_n\,,$$

где $\Phi_n$ – новая неизвестная функция. Вычисляем производные

$$\frac{d\Psi_n}{dx} = x\exp(x^2/2)\Phi_n + \exp(x^2/2)\frac{d\Phi_n}{dx}\,,$$

$$\frac{d^2\Psi_n}{dx^2} = (1+x^2)\exp(x^2/2)\Phi_n + 2x\exp(x^2/2)\frac{d\Phi_n}{dx} + \exp(x^2/2)\frac{d^2\Phi_n}{dx^2}$$

и подставляем в уравнение. При этом общий множитель $\exp(x^2/2)$ сократится, а слагаемые, пропорциональные $x^2$, взаимно уничтожатся:

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\Phi_n}{dx^2} - x\frac{d\Phi_n}{dx} - \frac{\Phi_n}{2} = E\Phi_n\,.$$

Подставляя для нулевого состояния $\Phi_0 = \exp(-x^2)$, убеждаемся, что уравнение выполняется при энергии $E_0 = 1/2$:

$$\underbrace{\exp(-x^2) - 2x^2\exp(-x^2)}_{-\Phi''/2} + \underbrace{2x^2\exp(-x^2)}_{-x\Phi'} - \underbrace{\frac{\exp(-x^2)}{2}}_{-\Phi/2} = \underbrace{\frac{1}{2}\exp(-x^2)}_{E\Phi}\,.$$

Выгода от замены переменной пока не очевидна. Но предположим, что мы нашли некоторое состояние $\Phi_n$, соответствующее энергии $E_n$, то есть выполняется уравнение

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\Phi_n}{dx^2} - x\frac{d\Phi_n}{dx} - \frac{\Phi_n}{2} = E_n\Phi_n\,.$$

Продифференцируем его еще раз:

$$-\frac{1}{2}\frac{d^3\Phi_n}{dx^3} - x\frac{d^2\Phi_n}{dx^2} - \frac{1}{2}\frac{d\Phi_n}{dx} = (E_n+1)\frac{d\Phi_n}{dx}\,.$$

В правой части к $E_n$ добавилась 1 из-за того, что среднее слагаемое слева содержало произведение $x\Phi_n'$ (дифференцирование множителя $x$).

Видим, что если $\Phi_n$ было решением для энергии $E_n$, то производная от $\Phi_n$ – решение того же уравнения, но при большей энергии $E_n + 1$. Далее можно еще раз взять производную и получить новое решение для еще на единицу большей энергии, и т.д. Таким образом, зная исходную функцию $\Phi_0 = \exp(-x^2)$, получаем целый набор:

$$\Phi_n = \frac{d^n\exp(-x^2)}{dx^n}\,, \quad \text{для энергии} \quad E_n = n + \frac{1}{2}\,.$$

В этом и состоит смысл на первый взгляд нелогичного преобразования $\Psi \Rightarrow \Phi$, с выделением множителя $\exp(x^2/2)$ (казалось бы, разумнее выделить $\exp(-x^2/2)$). Все функции $\Phi$ тогда получаются последовательным дифференцированием, а спад на бесконечности обеспечивается поведением $\Phi \sim \exp(-x^2)$. Возвращаясь к нормальной функции $\Psi$, получаем

$$\Psi_n = \exp(x^2/2)\frac{d^n \exp(-x^2)}{dx^n} = \exp(-x^2/2)H_n(x)\,, \quad \text{где} \quad H_n(x) = \exp(x^2)\frac{d^n \exp(-x^2)}{dx^n}\,.$$

Немного подумав, можно убедиться, что $H_n(x)$ – это многочлен степени $n$, так как экспоненты после дифференцирования сократятся. Функции $H_n(x)$ называются многочленами, или полиномами Эрмита (франц. Hermite).

Таким образом, мы получили сразу много решений уравнения Шредингера, спадающих на бесконечности благодаря множителю $\exp(-x^2/2)$. Энергии этих состояний действительно эквидистантны, соседние отличаются на 1, или в размерном виде на $\hbar\omega$. Правда, мы не доказали, что это – **все** интересующие нас состояния. Вдруг имеется решение с энергией, допустим, $\sqrt{17}$? Установлено, что при всех других энергиях вместо спадания волновая функция стремится к бесконечности с удалением от начала координат и поэтому не может описывать физической ситуации. Мы этого доказывать не будем.