Элементы квантовой механики.
Факультатив. Волна де Бройля.

При отражении электронных пучков от поверхности металла наблюдается диаграмма рассеяния электронов с узкими угловыми максимумами. Это похоже на дифракцию электронов на атомах металла, как на дифракционной решетке.

Де Бройль предположил, что любой частице, как и фотону, соответствует волна. Это волна вероятности поймать частицу. Сама вероятность пропорциональна квадрату модуля волны. Длину волны он нашел из соображений теории относительности.

Фаза любой волны $\left(\omega t-\vec{k},\vec{r}\right)$ — это скаляр по группе преобразований Лоренца независимо от природы волны: звуковые волны, световые волны, волны на поверхности воды. То есть при переходе из одной системы отсчета в другую, которая движется относительно первой системы отсчета, фаза любой волны не изменяется.

$\begin{pmatrix} ct \\ \vec{r} \end{pmatrix}$ — 4-х вектор относительно преобразований Лоренца.

$\left(\omega t-\vec{k},\vec{r}\right)$ — скалярное произведение вектора $\begin{pmatrix} ct \\ \vec{r} \end{pmatrix}$ на неизвестно что, равное $\begin{pmatrix} \frac{\omega}{c} \\ \vec{k} \end{pmatrix}$.

Тогда по соответствующей теореме тензорной алгебры $\begin{pmatrix} \frac{\omega}{c} \\ \vec{k} \end{pmatrix}$ — тоже 4-х вектор относительно преобразований Лоренца. Следовательно, $\begin{pmatrix} \frac{\hbar\omega}{c} \\ \hbar\vec{k} \end{pmatrix}$ — 4-х вектор для волны любой природы.

С другой стороны, $\begin{pmatrix} \frac{E}{c} \\ \vec{p} \end{pmatrix}$ — 4-х вектор для любой частицы.

Для фотона оба вектора равны, так как

$$\begin{cases} \dfrac{E}{c}=\dfrac{\hbar\omega}{c} \\ p=\hbar k \end{cases}.$$

Де Бройль предположил, что эти два 4-х вектора равны друг другу для любой частицы и соответствующей ей волны.

Тогда для любой частицы

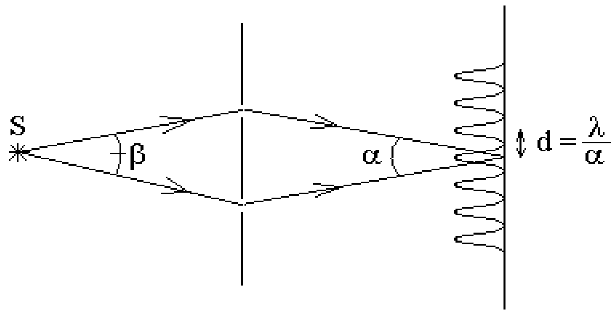
$$\begin{cases} E = \hbar\omega \\ p = \hbar k \end{cases}$$

$$p = \hbar k = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} \quad =>$$

$\lambda = \dfrac{h}{p}$ — длина волны де Бройля.

<u>Факультатив. Дифракция и интерференция электронов.</u>

Рассмотрим мысленный опыт по интерференции монокинетических электронов (электронов с одинаковыми скоростями) аналогичный опыту Юнга в оптике. Пусть электронный пучок вылетает из электронной пушки и проходит через два отверстия.



Чтобы интерференционные полосы не были слишком узкими, нужно чтобы скорость электронов была достаточной малой величины, та как ширина полос $d = \dfrac{\lambda}{\alpha}$ пропорциональна длине волны де Бройля $\lambda = \dfrac{h}{mV}$. В таком случае трудно создать пучок электронов с малым разбросом скоростей.

Тем не менее, опыты по дифракции и интерференции электронов проводятся с 1927 года. В качестве экрана для наблюдения интерференционной картины может быть использован люминесцирующий экран, такой как у осциллографа. Каждое попадание электрона на люминесцирующий экран сопровождается вспышкой света из соответствующей точки экрана. Для регистрации интерференционной картины вплотную к экрану можно приложить фотопластинку.

Интересно, что интерференционные полосы на экране сохраняются при сколь угодно слабом потоке электронов. Поток можно сделать настолько слабым, что электроны заведомо будут лететь по одному. Сохранение интерференционной картины означает, что каждый электрон интерферирует сам с собой, пролетая через оба отверстия.

Как же неделимый электрон пролетает через два отверстия? Может быть, он все же пролетает через одно отверстие? Но если второе отверстие лишнее, то, как объяснить тот факт, что при закрытии второго отверстия интерференционные полосы пропадают.

Значит, каждый электрон пролетает именно через оба отверстия. А можно ли в таком случае за одним отверстием поймать половину электрона? Нет, нельзя. Ловится или один электрон или ни одного.

А нельзя ли хотя бы мысленно за одним из отверстий поставить датчик, который будет регистрировать электрическое поле, пролетающего мимо электрона? Можно. Электроны при этом пролетают то через одно, то через другое отверстие, а интерференционная картина отсутствует, так как мы точно знаем, через какое отверстие пролетает каждый электрон.

А что будет, если датчик немного отодвинуть от отверстия в сторону, так чтобы он меньше возмущал пролетающий мимо электрон? Тогда контраст интерференционной картины увеличивается по мере того, как уменьшается надежность регистрации пролетающего мимо электрона.

Вывод. Для интерференции электронов за ними нельзя подсматривать. При этом не важно, подсматриваем мы на самом деле, важно только, возможно ли было принципиально подсмотреть или невозможно.

Пока электрон не пытаются локализовать на экране, электрона просто нет. Вместо него есть волна вероятности поймать электрон. Эта волна дифрагирует и интерферирует сама с собой. При удачной попытке локализовать электрон волна мгновенно пропадает во всем пространстве. От волны остается только вероятность, с которой можно было поймать электрон в каждой точке пространства. Эта вероятность пропорциональна квадрату модуля волны.

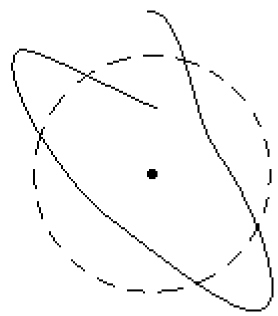
Интерференция атомов. Интерференция молекул. Интерференция нейтронов. Интерференция песчинок. Интерференция кошек. Интерференция людей.

α -распад атомного ядра. Кот Шредингера.

<u>**Факультатив. Квантование энергии атома водорода.**</u>

Атом водорода содержит ядро из одного протона и содержит один электрон, который вращается вокруг ядра. Поскольку электрон — это волна де Бройля, нарисуем электронную волну вокруг ядра атома водорода.

Будем откладывать положительные значения волны дальше от центра атома, а отрицательные — ближе к центру атома. Начнем рисовать волну с ее максимального значения.



Обойдя вокруг ядра атома, мы вернемся к исходной точке на орбите электрона, расположенной в исходном направлении относительно ядра атома.

При возвращении в исходную точку волна оказалась в другой фазе. Мы хотели нарисовать волну в один момент времени. Волна — это функция, которая в один момент времени в каждой точке орбиты должна иметь единственное значение. Функция не может быть многозначной. Следовательно, мы нарисовали неудачную волну, которая не может существовать.

Из рисунка видно, что существовать могут только такие волны, для которых на длине замкнутого пути укладывается целое число длин волн. Это условие необходимо и достаточно для однозначности волновой функции.

Тогда $2\pi r = n\lambda$, где n — целое число. Подставим сюда величину длины волны де Бройля $\lambda = \dfrac{h}{mV}$ и напишем в качестве второго уравнения системы второй закон Ньютона с силой Кулона, действующей на электрон, находящийся на круговой орбите. Тогда в системе СИ получим

$$\begin{cases} 2\pi r = n\dfrac{h}{mV} \\ m\dfrac{V^2}{r} = \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\dfrac{e^2}{r^2} \end{cases}$$

систему из двух уравнений с двумя неизвестными r и V.

Чтобы найти решение для переменной r нужно первое уравнение возвести в квадрат, второе уравнение умножить на r^2 и разделить первое уравнение на второе. Полученное таким образом r можно будет подставить, например, в первое уравнение системы, чтобы получить величину скорости V. Тогда получим решение системы:

$$\begin{cases} r = n^2\dfrac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \\ V = \dfrac{e^2}{2nh\varepsilon_0} \end{cases}.$$

Подставим это решение в выражение для полной энергии электрона и получим:

$$E_n = \frac{mV^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{me^4}{8h^2\varepsilon_0^2}\cdot\frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}.$$

Напомним, что здесь n — целое число, число длин волн, укладывающихся на круговой орбите электрона, его же называют главным квантовым числом. E_n — энергия n-го уровня энергии атома водорода.

Это правильные значения уровней энергии электрона без учета малых поправок. Не учтена поправка на магнитное взаимодействие спин-орбита; релятивистская поправка зависимости массы электрона от его скорости; поправка магнитного взаимодействия магнитного момента ядра с магнитным моментом электрона; поправка, связанная с рождением виртуальных электрон-позитронных пар вблизи атомного ядра.

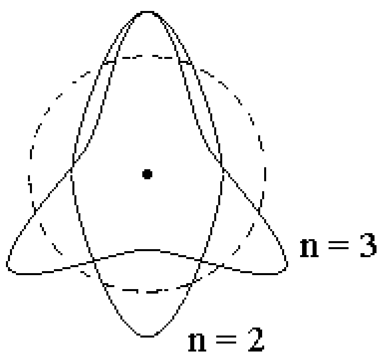
Мы получили, что энергия атома водорода квантуется, то есть принимает дискретные значения. Эти рассуждения являются основой квантовой механики. Если частица находится в ограниченном объеме, то на длине замкнутого пути должно укладываться целое число длин волн. Следовательно, длина волны де Бройля может принимать только дискретные значения, отсюда получаем дискретные значения импульса, дискретные значения энергии и других величин. Если же частица не ограничена в своем движении, то длина волны де Бройля может принимать любые значения из непрерывного спектра, тогда и другие связанные с ней величины принимают любые непрерывные значения.

Для электрона в атоме водорода, если полная энергия электрона отрицательная, то электрон находится в связанном состоянии, он не может уйти на бесконечное расстояние, отсюда получаются дискретные уровни отрицательной энергии электрона. Если полная энергия электрона положительная, то он может бесконечно удалиться, значит, он не ограничен в своем движении. Тогда уровни энергии электрона с положительной энергией принимают любые значения из непрерывного спектра значений.

Факультатив. Полуклассическое описание излучения и поглощения света. Разрешенные и запрещенные переходы. Правила отбора.

Полуклассическое описание — это квантовое описание вещества и классическое описание светового поля без вторичного квантования или квантования поля.

Рассмотрим, что будет в том случае, если один электрон в одном атоме водорода одновременно находится и в состоянии $n = 2$ и в состоянии $n = 3$? Такое состояние атома называют суперпозиционным состоянием. Изобразим две рассматриваемые волны на одном рисунке. В состоянии $n = 2$ на длине пути электрона укладывается две волны де Бройля, в состоянии $n = 3$ — три волны.



Из рисунка видно, что в верхней части траектории электрона обе волны одновременно достигают максимума. При их сложении получится волновая функция большой величины. В нижней части траектории одна из волн принимает положительное значение, а другая — отрицательное. Сумма двух волн в этой части траектории мала.

Вверху, где волновая функция имеет большую величину, окажется большая плотность электронного облака. Внизу, где волновая функция мала, плотность электронного облака будет мала. В результате электронное облако окажется смещенным вверх относительно ядра атома. Центр тяжести отрицательно заряженного электронного облака оказывается выше положительно заряженного ядра. Это означает, что распределение зарядов системы имеет электрический дипольный момент $\vec{p}$:

$$\vec{p} = \sum_i q_i \vec{r}_i = \int_V \rho(\vec{r}) \cdot \vec{r} \cdot d\vec{r} .$$

Атом имеет отличный от нуля дипольный момент тогда и только тогда, когда он одновременно находится на двух уровнях энергии. Уровни энергии атома — это то же самое, что и уровни энергии электронов в атоме.

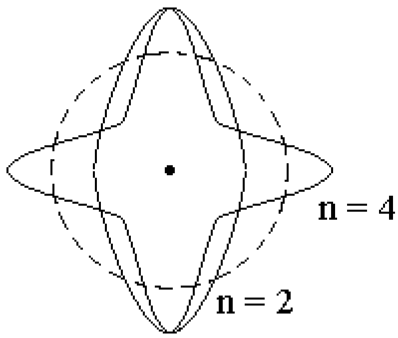
Заметим, что это не постоянный дипольный момент, а осциллирующий с частотой перехода между двумя уровнями энергии, на которых каждый атом одновременно находится. И действительно. Для волны де Бройля:

$$\begin{cases} E = \hbar\omega \\ p = \hbar k \end{cases}.$$

Если электрон находится одновременно в двух состояниях $n = 2$ и $n = 3$, то каждой из двух соответствующих энергий соответствует своя частота осцилляций волновой функции $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$ одинаковая в каждой точке пространства. Две волны состояний $n = 2$ и $n = 3$ в каждой точке пространства оказываются то в одинаковой фазе, то в противоположных фазах. Соответственно, результат сложения двух волн испытывает биения с разностной частотой $\omega_{32} = \omega_3 - \omega_2 = \frac{E_3}{\hbar} - \frac{E_2}{\hbar} = \frac{E_3 - E_2}{\hbar}$. Так же как и результат сложения волн осциллирует и плотность электронного облака, и дипольный момент атома.

Осциллирующий дипольный момент излучает свет на частоте осцилляций или, как говорят, на частоте перехода $\omega_{32} = \frac{E_3 - E_2}{\hbar}$. Атом излучает или поглощает свет на частоте некоторого перехода тогда и только тогда, когда он одновременно находится на двух уровнях энергии, связанных рассматриваемым переходом.

Рассмотрим теперь суперпозиционное состояние атома водорода, когда он одновременно находится на уровнях $n = 2$ и $n = 4$.



Из рисунка видно, что плотность электронного облака сверху и снизу одновременно становится большой и одновременно становится малой. Нет дипольного момента в таком суперпозиционном состоянии атома. Если нет осциллирующего дипольного момента, то атом в таком состоянии не излучает и не поглощает свет. В таком случае переход между этими уровнями энергии называют запрещенным переходом или переходом, запрещенным в дипольном приближении.

Заметим, что осциллирующий электрический квадрупольный момент в рассматриваемом суперпозиционном состоянии присутствует, но излучение квадрупольного момента гораздо слабее, чем излучение дипольного момента в том случае, когда размер излучающей системы гораздо меньше длины волны света. Для атома, как излучающей системы, именно такой случай и реализуется. Характерный диаметр атомов — десятые доли нанометра, а оптическая длина волны — десятые доли микрона. По этой причине излучением более высоких мультипольных моментов атома обычно пренебрегают по сравнению с излучением дипольного момента атома.

Из приведенного рассмотрения можно сформулировать правило отбора. Если при сложении волновых функций двух состояний получается волновая функция со смещенным центром тяжести, то переход между этими двумя состояниями разрешен.

<u>Факультатив. Дифференциальное уравнение для волновой функции.</u>

В разных точках пространства, например, вокруг ядра атома водорода, электрон имеет разную потенциальную энергию. Двигаясь вокруг ядра атома, например, по эллиптической орбите, электрон будет иметь разную кинетическую энергию в разных точках орбиты. С кинетической энергией связан импульс $E_{кин} = \dfrac{p^2}{2m}$, а с импульсом связана длина волны де Бройля $\lambda = \dfrac{h}{p}$.

В таком случае при движении электрона по эллиптической орбите его полная энергия и частота волны де Бройля не изменяются $E_{полн} = \hbar\omega$, а длина волны изменяется в зависимости от величины импульса.

Это похоже на распространение света в среде с переменным показателем преломления, величина которого зависит от потенциальной энергии электрона в каждой точке пространства.

Оператор импульса. Среднее значение любой физической величины. Оператор любой физической величины.

Соответствующее дифференциальное уравнение для волны де Бройля — это уравнение Шредингера.

Факультатив. Сжатое состояние света.

Напомним соотношения неопределенности Гейзенберга. Соотношение между энергией и временем $\Delta E\,\Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$, соотношение между проекцией импульса и координатой $\Delta p_x\,\Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$.

Аналогичное соотношение неопределенности существует между числом фотонов в одном объеме когерентности и фазой светового поля. Это соотношение удобнее записать, как соотношение неопределенности между двумя амплитудами светового поля $\mathcal{E}_{01}$ и $\mathcal{E}_{02}$ с колебаниями, сдвинутыми по фазе друг относительно друга на $\frac{\pi}{2}$. Световое поле может быть представлено в следующем виде:

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_{01}\cos(\omega t) + \mathcal{E}_{02}\sin(\omega t).$$

В вакууме световое поле можно записать в виде выражения:

$$\mathcal{E}(t) = \sqrt{\frac{8\pi\hbar\omega}{V}}\left(\alpha_1\cos(\omega t) + \alpha_2\sin(\omega t)\right),$$

где α — величина пропорциональная амплитуде светового поля, такая что $\alpha^2 = \frac{W}{\hbar\omega}$ — это число фотонов в объеме V, $\hbar\omega$ — энергия одного фотона, ω — частота света, $W = wV$ — энергия светового поля в том же объеме V, w — объемная плотность энергии. С амплитудой поля $\mathcal{E}_0$ связана интенсивность света $I = \frac{cn}{8\pi\mu}\mathcal{E}_0^2$, кроме того $I = w\frac{c}{n}$. Будем далее считать, что V — объем когерентности.

Для обычного света соотношение неопределенности для числа фотонов в объеме когерентности и фазы светового поля может быть записано в следующем виде:

$$\left\langle (\Delta\alpha_1)^2 \right\rangle + \left\langle (\Delta\alpha_2)^2 \right\rangle \geq \frac{1}{2},$$

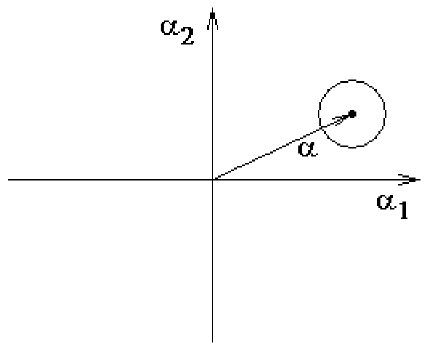
что следует из теории вторичного квантования (квантования светового поля).

Теория квантования света строится по аналогии с квантовым описанием гармонического осциллятора. Рассмотрим в качестве осциллятора груз, висящий на пружинке. В результате квантового рассмотрения осциллятора можно получить, что возможные уровни энергии осциллятора имеют вид $E_n = \frac{1}{2}h\nu + nh\nu$, где $n = 0,1,2,3,...$ — целое число, ν — резонансная частота колебаний осциллятора.

Нижний уровень энергии осциллятора оказывается отличным от нуля $E_0 = \frac{1}{2}h\nu$. Это связано с соотношением неопределенности Гейзенберга $\Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2}$. Согласно этому соотношению грузик осциллятора не может полностью остановится, так как в этом случае оказалось бы, что $\Delta y = 0$. Со средним квадратом импульса связан средний квадрат кинетической энергии, а со средним квадратом отклонения от равновесия связано среднее значение потенциальной энергии. В результате среднее значение полной энергии осциллятора в нижнем энергетическом состоянии отлично от нуля и равно $E_0 = \frac{1}{2}h\nu$.

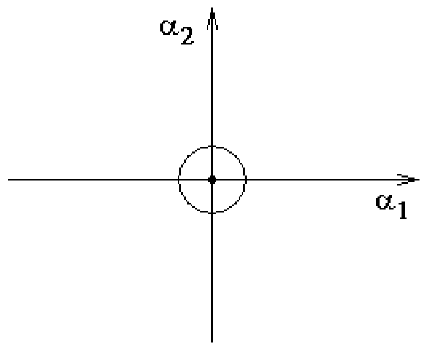
Уравнения для светового поля оказываются очень похожими на уравнения для осциллятора. По этой причине считают, что энергия светового поля в каждом объеме когерентности $E_n = \frac{1}{2}h\nu + nh\nu$, и минимальная энергия в каждом объеме когерентности $E_0 = \frac{1}{2}h\nu$. Отсюда и следует соотношение $\left\langle \left(\Delta\alpha_1\right)^2 \right\rangle + \left\langle \left(\Delta\alpha_2\right)^2 \right\rangle \geq \frac{1}{2}$.

Введем в рассмотрение плоскость с координатами α_1 и α_2. На этой плоскости границу неравенства можно отобразить, как окружность с радиусом $\alpha_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$:



.

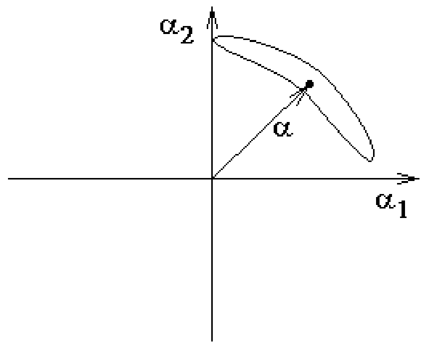
Если света совсем нет, то в каждом объеме когерентности, тем не менее, содержится энергия светового поля $\left\langle \alpha_1^2 \right\rangle + \left\langle \alpha_2^2 \right\rangle = \frac{1}{2}$ равная энергии половины фотона $\frac{\hbar\omega}{2}$:



.

Это та самая энергия вакуума, под действием которой происходят спонтанные переходы с возбужденных уровней энергии на более низкие уровни с одновременным излучением кванта света аналогично вынужденным переходам под действием света.

Оказывается границу неравенства на плоскости α_1 и α_2 можно сжать, но только так, что площадь внутри границы не изменится:



.

На этом рисунке неопределенность амплитуды поля и, соответственно, числа фотонов уменьшилась ценой увеличения неопределенности фазы светового поля. Здесь фаза — это угол поворота на плоскости α_1, α_2.

Создать такое сжатое состояние света можно, например, с помощью среды, показатель преломления которой зависит от амплитуды световой волны $n = n_0 + n_2 \mathcal{E}_0^2$.

Пусть с ростом амплитуды показатель преломления уменьшается. Есть эксперимент, в котором излучение лазера пропускается через длинное стекловолокно из такого материала. Если амплитуда света испытывает случайное увеличение, то показатель преломления уменьшается, что приводит к увеличению фазовой скорости света в веществе. При этом излучение лазера, вышедшее из него в единицу времени, занимает в стекловолокне объем с большей длиной. Следовательно, уменьшается объемная плотность энергии светового поля, и амплитуда поля обратно уменьшается.

Таким образом, случайное увеличение амплитуды поля ведет к его уменьшению. В результате формируется свет, сжатый по амплитуде.

Подробнее о сжатых состояниях света можно найти информацию в Интернете, например:

http://ufn.ru/ufn93/ufn93_9/Russian/r939d.pdf

http://www.jetpletters.ac.ru/ps/1010/article_15351.pdf