

# ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

## Лекция 3. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Последовательная теория атома (равно как ядра и элементарных частиц) основана на законах квантовой механики.

*Квантовая механика (волновая механика) – теория, устанавливающая способ описания и законы движения физических систем, для которых величины, характеризующие систему и имеющие размерность действия, оказываются сравнимыми с постоянной Планка  $\hbar$ . Этому условию удовлетворяет, как правило, движение микрочастиц (электронов в атоме, атомов в молекулах, нуклонов в ядрах и т.д.). Однако в некоторых случаях специфическими квантовыми свойствами облают макроскопические системы как целое.*

Квантовая механика представляет собой систему понятий и адекватный ей математический аппарат, необходимый и достаточный для описания всех наблюдаемых свойств соответствующих систем и их движения.

Квантовомеханическая теория объясняет устойчивость атома, необъяснимую в рамках классической физики, а также позволяет достаточно точно рассчитать для простейших атомов уровни энергии, вероятности переходов и т.д., с помощью различных приближений можно рассчитывать характеристики сложных атомов. На основе квантовых представлений с единой точки зрения можно объяснить оптические, магнитные, электрические и химические свойства атома, а также периодическую систему элементов.

В данной лекции мы остановимся лишь на основных понятиях квантовой механики, знание которых позволяет лучше понять закономерности распада атомных ядер.

### 1. ОСОБЕННОСТИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Для классической механики характерно описание частиц путём задания их координат и скоростей в зависимости от времени. Такому описанию соответствует движение частиц по вполне определённым траекториям. Однако опыт показал, что это описание не всегда справедливо в случае частиц с очень малой массой (микрочастиц). В этом состоит одно из ограничений применимости механики Ньютона. Более общее описание движения даёт квантовая механика, которая включает в себя как частный случай классическую механику. Квантовая механика делится на нерелятивистскую, справедливую при малых скоростях, и релятивистскую, удовлетворяющую требованиям специальной теории относительности.

Нерелятивистская квантовая механика (как и механика Ньютона для своей области применимости) – вполне законченная и логически непротиворечивая теория, способная в области своей применимости количественно описать любое физическое явление. Напротив, релятивистская квантовая механика за исключением отдельных частных задач не может считаться замкнутой теорией, а представляет собой составную часть квантовой теории поля (со всеми присущими ей трудностями). Это связано с тем, что при взаимодействии релятивистских частиц в игру неизбежно вовлекаются полевые степени свободы.

Соотношение между классической и квантовой механикой определяется универсальной мировой постоянной – постоянной Планка  $h=6,62 \cdot 10^{-27}$  эрг·с (или  $\hbar=h/2\pi=1,05 \cdot 10^{-27}$  эрг·с), называется также квантом действия. Если в условиях данной задачи физические величины размерности действия значительно больше  $\hbar$  (так что  $\hbar$  считать очень малой величиной), то применима классическая механика, - именно это условие и является критерием её применимости.

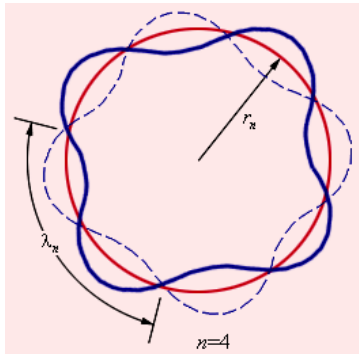


Рис. 1. Волна де Бройля в атоме при квантовом числе  $n=2$ .

### 2. КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОЙ ДУАЛИЗМ

*Корпускулярно-волновой дуализм заключается в том, что любые микрочастицы материи (фотоны, электроны, протоны, атомы и др.) обладают свойствами и частиц (корпускул) и волн. Количественное выражение корпускулярно-волнового дуализма – соотношения де Бройля.*

Истоки корпускулярно-волнового дуализма связаны с экспериментальным обнаружением явления механического давления света, оказываемого им на освещаемую поверхность. В этих экспериментах (опыты П.Н.Лебедева, 1900) использовалась вертушка с лепестками из электропроводящих материалов. Классическое объяснение сводилось к взаимодействию поля магнитной индукции  $\mathbf{B}$  с токами

проводимости, индуцированными электромагнитной волной в материале лепестков вертушки. Данное объяснение исчерпывающее и не нуждается в каких-либо дополнениях. Однако сам факт наличия механического давления на отражающую поверхность подтолкнул физиков искать простую механистическую трактовку эффекта, проявившегося в данных опытах, и предположить аналогию электромагнитных волн с потоком неких корпускул - фотонов. Непосредственное же внедрение корпускулярно-волновой дуализма связано с экспериментами по дифракции электронов, а так же с интерпретацией эффекта Комптона.

Французский ученый Луи де Бройль осознавая существующую в природе симметрию и развивая представления о двойственной корпускулярно-волновой природе света, выдвинул в 1923 гипотезу об универсальности корпускулярно-волнового дуализма. Он утверждал, что не только фотоны, но и электроны и любые другие частицы материи наряду с корпускулярными обладают также волновыми свойствами. Согласно де Бройлю, с каждым микрообъектом связываются, с одной стороны, корпускулярные характеристики - энергия  $E$  и импульс  $p$ , а с другой стороны - волновые характеристики - частота и длина волны.

Физической основой квантовой механики является корпускулярно-волновой дуализм – всеобщее и универсальное свойство материи, согласно которому не только любой волне с частотой  $\nu$  и волновым вектором  $k$  отвечает частица с энергией  $E$  и импульсом  $p$ , соответственно равными:

$$E = \hbar \nu, \quad p = \hbar k, \quad (1)$$

С учётом известного уравнения Эйнштейна имеем:

$$mc^2 = \hbar \nu \quad (2)$$

В то же время, с любой частицей, обладающей энергией  $E$  и импульсом  $p$ , связана волна, частота  $\nu$  и волновой вектор которой  $k$  определяется соотношением (1). Наличие у частиц волновых свойств доказано в огромном числе экспериментов. Интерференция и дифракция наблюдались для электронов, нейтронов, атомных ядер, атомов, молекул. Волновые свойства нейтронов лежат в основе нейтронной оптики.

Замечание. Иногда говорят, что формулу де Бройля можно «вывести». При этом записывают постулаты Планка  $E = \hbar \nu$  и Эйнштейна  $E = mc^2 = pc$ . Комбинируя оба равенства, можно «вывести» формулу де Бройля:  $mc^2 = \hbar \nu$ . Но необходимо помнить, что как формула Планка, так и Эйнштейна, являются гипотезами.

Принципиального различия между описанием материи на языке волн или корпускул нет. Это – вопрос удобства расчётов конкретной ситуации. Например, в терминах частиц естественно описывать материю в терминах частиц при использовании величин импульсов, кинетических энергий, и т.д. Также естественно использовать волны для описания света. Однако, каждой материальной частице соответствует волновое описание, причём длина волны (длина волны Де Бройля) задаётся как

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (3)$$

где  $p$  – импульс частицы и  $h$  – постоянная Планка. (Заметим, что постоянная Планка очень мала  $h = 6,6 \cdot 10^{-34}$  Дж/с. Потому длина волны частицы важна только когда импульс экстремально мал, как это имеет место у электрона, масса которого  $9 \cdot 10^{-31}$  кг). Выражение для длины волны Де Бройля можно записать в рациональных единицах:

$$\lambda = \frac{\hbar}{p} \quad (4)$$

где  $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 6,58212 \cdot 10^{-22}$  МэВ\*с.

Эти выражения относятся к классическим приближениям. В релятивистском приближении (при скоростях, близких к скорости света):

$$\lambda = \frac{\hbar c}{\sqrt{E_k(E_k + 2m_0c^2)}} \quad (5)$$

Значения типичных длин волн для некоторых частиц приведены в **Табл. 1**. Они даны в обычных ядерных размерах  $10^{-13}$  см. **Табл. 1** демонстрирует энергии, при которых частицы будут иметь длины волны сравнимые или меньшие, размеров ядра. Приведённые здесь частицы можно использовать как зонды размеров ядер и их формы.

**Табл. 1.** Типичные величины длин волн Де Бройля.

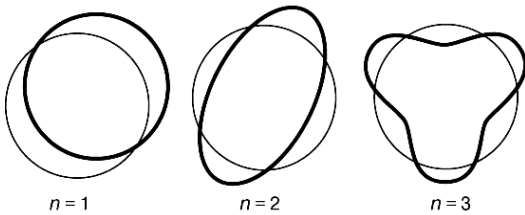
Энергия, МэВ	Длина волны, см		
	Фотон	Электрон	Протон
0,1	$1,2 \cdot 10^{-9}$	$3,7 \cdot 10^{-10}$	$9,0 \cdot 10^{-12}$
1	$1,2 \cdot 10^{-10}$	$8,7 \cdot 10^{-11}$	$2,9 \cdot 10^{-12}$
10	$1,2 \cdot 10^{-11}$	$1,2 \cdot 10^{-11}$	$0,9 \cdot 10^{-12}$
100	$1,2 \cdot 10^{-12}$	$1,2 \cdot 10^{-12}$	$2,8 \cdot 10^{-13}$
1000	$1,2 \cdot 10^{-13}$	$1,2 \cdot 10^{-13}$	$0,7 \cdot 10^{-13}$

Аналогично можно описать фотон

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{E_\gamma} = \frac{1,2397 \cdot 10^{-10}}{E_\gamma (\text{МэВ})} \text{ (см)} \quad (6)$$

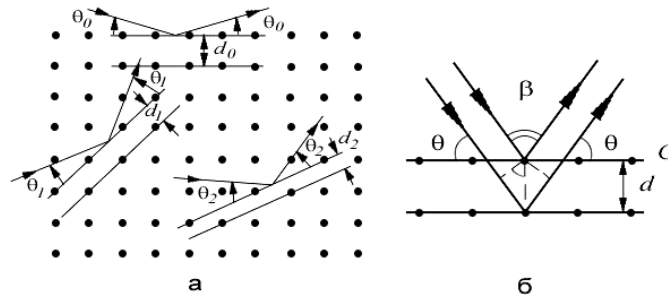
Но часто приходится говорить о фотоне, как о частице, например, когда он поглощается ядром, или выделяется из него. Тогда

$$E_\gamma = h\nu = pc. \quad (7)$$



**Рис. 2.** Стоячие волны де Бройля, укладывающиеся вдоль круговой орбиты. Орбита показана тонкой линией,  $n$  – число полных волн, укладывающихся вдоль нее.

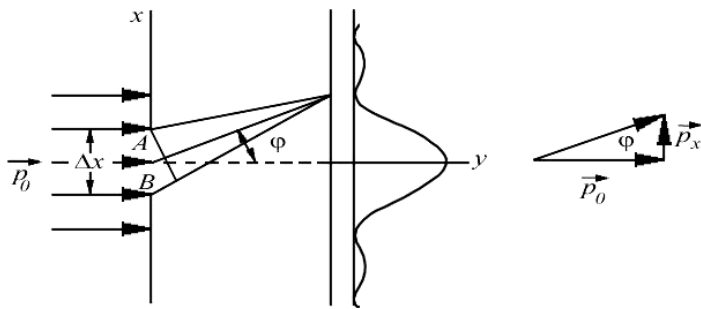
Гипотеза де Бройля была подтверждена экспериментально опытами Лауэ, Фабриканта, Дэвиссона и Джермера, Томсона и Тартаковского по дифракции и интерференции индивидуальных микрообъектов: электронов, протонов и других частиц.



**Рис. 3.** Схема эксперимента по изучению дифракции электронов.

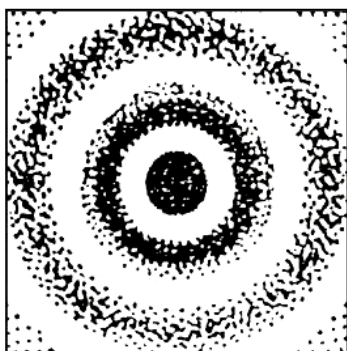
**Дифракция частиц** – рассеяние потока микрочастиц (электронов, нейтронов, атомов и молекул и др.) кристаллами или молекулами жидкостей и газов с образованием чередующихся максимумов и минимумов в интенсивности рассеянного пучка. Дифракция частиц аналогична дифракции света и является проявлением корпускулярно-волнового дуализма частиц; наблюдается для частиц, волна де Бройля для которых порядка расстояния между рассеивающими центрами. Дифракционная картина зависит от внутреннего строения рассеивающего объекта. На дифракции частиц основаны электронография и нейтронография.

Дифракционные явления проявляются наиболее отчетливо, когда размеры препятствия, на котором происходит дифракция волн, соизмеримы с длиной волны. Это относится к волнам любой физической природы и, в частности, к электронным волнам. Для волн де Бройля естественной дифракционной решеткой является упорядоченная структура кристалла с пространственным периодом порядка размеров атома (приблизительно 0,1 нм). Препятствие таких размеров (например, отверстие в непрозрачном экране) невозможно создать искусственно, но для уяснения природы волн де Бройля можно ставить мысленные эксперименты.



**Рис.4.** Картина дифракции электрона на щели.

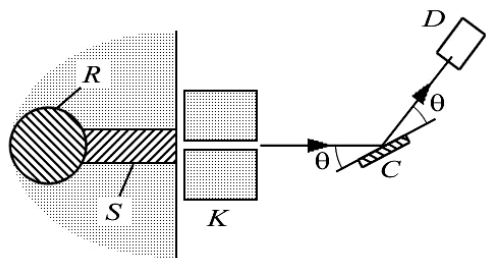
Подтвержденная экспериментально гипотеза де Бройля о корпускулярно-волновом дуализме коренным образом изменила представления о свойствах микрообъектов.



**Рис. 5.** Распределение дифрагировавших электронов по фотопластинке

С точки зрения волновой теории, максимумы в картине дифракции электронов соответствуют наибольшей интенсивности волн де Бройля. В области максимумов, зарегистрированных на фотопластинке, попадает большое число электронов. Но процесс попадания электронов в различные места на фотопластинке не индивидуален. Принципиально невозможно предсказать, куда попадет очередной электрон после рассеяния, существует лишь определенная вероятность попадания электрона в то или иное место.

Таким образом, описание состояния микрообъекта и его поведения может быть дано только на основе понятия вероятности.



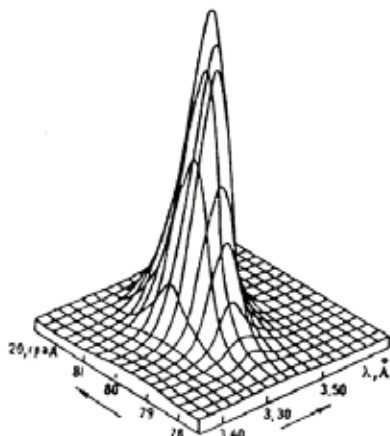
**Рис. 6.** Схема экспериментальной установки для наблюдения дифракции нейтронов (источник нейтронов – атомный реактор R (S – замедлитель нейтронов)

Это с неизбежностью ведёт к отказу от некоторых классических представлений, сформировавшихся в результате наблюдения движения макроскопических тел. В частности, наблюдение волновых явлений несовместимо с представлением о движении частицы по определённой классической траектории. Здесь существенно, что соотношения (1), согласно которым с волной может быть сопоставлена частица, определяет лишь энергию и импульс этой частицы, не требуя её движения по какой-либо определённой траектории.

Отказ от полностью детерминированного описания движения отдельной частицы и переход к вероятностному описанию, адекватному принципу суперпозиции состояний, позволяет совместить волновые и корпускулярные свойства материи. Вероятностное описание, таким образом, отвечает фундаментальным свойствам движения микрообъектов и не связано с какой-либо неполнотой сведений о них. Подчеркнём, однако, что в его основе лежит чуждое классической теории вероятностей понятие амплитуды вероятности, т.е. комплексного числа, у которого физический смысл имеет не только квадрат модуля (равный вероятности), но и фаза (точнее, разность фаз двух амплитуд, соответствующая разности фаз волн). Именно использование амплитуд вероятности позволяет отразить волновые свойства объектов при их корпускулярном описании.

Именно использование амплитуд вероятности позволяет отразить волновые свойства объектов при их корпускулярном описании.

**Рис. 7.** Дифракционный максимум интенсивности нейтронов, отраженных от монокристалла CsHSeO<sub>4</sub>



Таким образом, в отличие от классической теории, все частицы выступают в квантовой механике как носители и корпускулярных, и волновых свойств, которые не исключают, а добавляют друг друга.

**Волны де Бройля** – проявление универсального корпускулярно-волнового дуализма материи: любой частице с энергией  $E$  и импульсом  $p$  соответствует волна, названная волной де Бройля, с длиной  $\lambda = h/p$  и частотой  $\nu = E/h$ , где  $h$  – постоянная Планка (1924). Волны де Бройля интерпретируются как волны вероятности: их существование подтверждается, например, дифракцией частиц.

**Пример.** Пучок 1 эВ нейтронов падает на кристалл. Брэгговские рефлексы 1-го порядка наблюдаются при  $11,8^\circ$ . Чему равно расстояние между кристаллическими плоскостями?

**Решение.** Дифракция низкоэнергетических электронов аналогична дифракции рентгеновского излучения. Условие Брэгга  $n\lambda=2d\sin\theta$ , где индекс  $n=1$  для дифракции 1-го порядка.

$$\lambda=2d\sin\theta \quad (8)$$

$$d = \frac{\lambda}{2\sin\theta} = \frac{\frac{h}{p}}{2\sin\theta} = \frac{\frac{h}{\sqrt{2mE_k}}}{2\sin\theta} \quad (9)$$

$$d = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}}{2\sin(11,8^\circ) \sqrt{2 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ кг} \cdot 1,60 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}}} = 7,0 \cdot 10^{-11} \text{ м} \quad (10)$$

### 3. ПРИНЦИП НЕОПРЕДЕЛЁННОСТИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Из квантовой механики вытекает, что не все физические величины могут одновременно иметь точные значения (принцип неопределённости).

**Неопределённости принцип** – фундаментальное положение квантовой теории, утверждающее, что характеризующие систему дополнительные физические величины (например, координата и импульс) не могут одновременно принимать точные значения. Отражает двойственную корпускулярно-волновую природу частиц материи (электронов, протонов и т.д.).

**Принцип неопределённости Гейзенберга** — закон, устанавливающий ограничение на точность (почти) одновременного измерения переменных состояния, например положения и импульса частицы. Точно определяет меру неопределённости, давая нижний (ненулевой) предел для произведения дисперсий измерений.

**Неопределённости соотношения** – фундаментальные соотношения квантовой механики, устанавливающие предел точности одновременного определения канонически-сопряжённых динамических переменных, характеризующих квантовую систему: координата – импульс, действие-угол и т.д.

Это - один из основных постулатов квантовой механики, установленный В.Гейзенбергом в 1927 при анализе мысленного эксперимента по измерению координаты квантового объекта с помощью «гамма-микроскопа».

Принцип неопределённости Гейзенберга устанавливает предел одновременного знания на то, где что-то находится и как быстро оно движется. Формально это записывается

$$\begin{aligned} \Delta p_x \cdot \Delta x &\geq \hbar \\ \Delta p_y \cdot \Delta y &\geq \hbar \\ \Delta p_z \cdot \Delta z &\geq \hbar \\ \Delta E \cdot \Delta t &\geq \hbar \end{aligned} \quad (11)$$

где  $\Delta p_x$ ,  $\Delta x$  – неточности в  $x$ -компоненте импульса и  $x$  координате, соответственно, в то время как  $\Delta t$  – время жизни частицы и  $\Delta E$  – неточность в её общей энергии. Эти пределы знаний не связаны с ограничениями со стороны измерительных инструментов. Фундаментальные пределы существуют даже для идеальных и абсолютно точных инструментов.

**Пример.** Рассмотрим электрон с кинетической энергией 5 эВ. Его скорость

$$v = \sqrt{\frac{2E_k}{m}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 5 \cdot (1,602 \cdot 10^{-19}) \text{ Дж} / \text{эВ}}{9,11 \cdot 10^{-31} \text{ кг}}} = 1,33 \cdot 10^6 \text{ м/с}$$

Тогда импульс

$$p = mv = 1,21 \cdot 10^{-24} \text{ кг} \cdot \text{м/с}$$

Пусть ошибка измерения составляет 1%. Тогда из принципа неопределённости:

$$\Delta x = \frac{\hbar}{\Delta p} = \frac{1,06 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}}{1,21 \cdot 10^{-26} \text{ кг} \cdot \text{м/с}} = 8,8 \cdot 10^{-9} \text{ м}$$

Неточности при одновременном определении дополнительных величин связаны с соотношением неопределённостей, которое для неточностей  $\Delta x$  и  $\Delta p_x$  в определении координаты  $x$  и проекции на неё импульса  $p$  имеет вид неравенства:

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (12)$$

**Замечание 1.** В некоторых рассмотренных «неопределённость» переменной определяется как наименьшая ширина диапазона, который содержит 50 % значений, что, в случае нормального распределения переменных, приводит для произведения неопределённостей к большей нижней границе  $\hbar/2\pi$ .

**Замечание 2.** Здесь



$$\Delta X = \left\langle (X - \langle X \rangle)^2 \right\rangle^{1/2}, \quad \Delta P = \left\langle (P - \langle P \rangle)^2 \right\rangle^{1/2}. \quad (13)$$

То есть в соответствии с вероятностной интерпретацией квантовой механики, под неточностями координаты и импульса понимают среднеквадратичные отклонения от этих наблюдений.

Это неравенство даёт несколько возможностей - состояние может быть таким, что  $x$  может быть измерен с высокой точностью, но тогда  $p$  будет известен только приблизительно, или наоборот  $p$  может быть определен точно, в то время как  $x$  - нет. Во всех же других состояниях, и  $x$  и  $p$  могут быть измерены с «разумной» (но не произвольно высокой) точностью. В повседневной жизни мы обычно не наблюдаем неопределенность потому, что значение  $\hbar$  чрезвычайно мало.

В 1929 Х.П.Робертсон показал, что  $\Delta x^2 \cdot \Delta p_x^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$ , причём  $\Delta x$  и  $\Delta p_x$  определяются как среднеквадратичные отклонения:

$$\Delta x^2 = \overline{(x_i - \bar{x})^2}, \quad \Delta p_x^2 = \overline{(p_{xi} - \bar{p}_x)^2} \quad (14)$$

Он же доказал, что равенство в (9) достигается только для квантовых состояний, описываемых гауссовыми волновыми пакетами. Э.Шрёдингер предложил более общую формулу для случая коррелированных состояний.

**Замечание 1.** Принцип неопределенности не относится только к координате и импульсу. В своей общей форме, он применим к каждой паре *сопряженных переменных*. В общем случае, и в отличие от случая координаты и импульса, обсужденного выше, нижняя граница произведения неопределенностей двух сопряженных переменных зависит от состояния системы. Принцип неопределенности становится тогда теоремой в теории операторов.

**Замечание 2.** Соотношение неопределенности Гейзенберга с необходимостью приводит к пересмотру понятия причинности. Мы можем определить координату с абсолютной точностью, но в тот момент, когда это происходит, импульс принимает совершенно произвольное значение, положительное или отрицательное. Это означает, что объект, положение которого нам удалось измерить абсолютно точно, тотчас же перемещается сколь угодно далеко. Локализация утрачивает смысл: понятия, составляющие самую основу классической механики, при переходе к квантовой механике претерпевают глубокие изменения.

Соотношение неопределенностей позволяет оценить, в какой мере можно применять к микрочастицам понятия классической механики. Оно показывает, что к микрообъектам неприменимо классическое понятие траектории, так как движение по траектории характеризуется в любой момент времени определенными значениями координат и скорости.

Отношение неопределенности между двумя ортогональными компонентами оператора полного углового момента частицы:

$$\Delta J_i \Delta J_j \geq \frac{\hbar}{2} |\langle J_k \rangle|, \quad (15)$$

где  $i, j, k$  отличны и  $J_i$  обозначает угловой момент вдоль оси  $x_i$ .

Отношение неопределенности между энергией  $E$  и временем  $t$  требует особого рассмотрения, т.к. по смыслу оно отличается от выражения (3). Дело в том, что не существует оператора, представляющего время, поэтому время не является динамической переменной и должно рассматриваться как параметр.

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (16)$$

Для нестационарных состояний с характерным разбросом энергии  $\Delta E$  под величиной  $\Delta t$  в (16) следует понимать промежуток времени, в течение которого существенно (на величину соответствующей дисперсии) изменяются средние значения физических величин, характеризующих систему. Пусть микрообъект нестабилен и  $\Delta t$  – время его жизни. Энергия микрообъекта в данном состоянии должна иметь неопределенность  $\Delta E$ . Если состояние стационарно ( $\Delta t \rightarrow \infty$ ), то энергия микрообъекта точно определена  $\Delta E=0$ .

Обычно Ур(16) трактуется как невозможность точного определения энергии квантовой системы ( $\Delta E=0$ ) за ограниченный интервал времени  $\Delta t$ . Н.Бор обращал внимание на невозможность определить понятие монохроматической волны в данный момент времени. Другая трактовка тесно связана с понятием квазистационарного состояния. В этом случае  $\Delta E$  – неопределённость значения, которое приобретает энергия  $E$ , рассматриваемая как динамическая характеристика квантовой системы, изменяющаяся во времени, а  $\Delta t$  – интервал времени – характеризующий эволюцию  $E$  в интервале значения  $\Delta E$ . Для возбуждённых квантовых систем (например, атома или молекулы) неопределённость энергии состояния  $\Delta E$  (естественная ширина уровня) непосредственно связана с его временем жизни с помощью (16).

Рассмотрим некоторые примеры применения соотношения неопределённости.

**Пример 1.** Обратимся к квантованным уровням энергии атома водорода по Бору. Пусть электрон находится на уровне  $E_1$ . Чтобы перейти на уровень  $E_2$ , электрон должен поглотить фотон с энергией  $(E_2 - E_1)$  и никакой другой. Возникает вопрос, каким образом электрон производит «выбор» нужного фотона из падающего потока фотонов? Ведь для этого он должен побывать на уровне  $E_2$  заранее, то есть «знать»  $E_2$ . Получаем замкнутый логический круг.

Теперь вопрос о том, что происходит сначала – поглощение фотона или переход электрона – теряет свой смысл. Если до и после взаимодействия с излучением имеем связанный электрон с энергией  $E_1$  и  $E_2$ , то во время излучения есть единая квантово - механическая система, включающая в себя и электрон и фотон. Эта система существует конечное время и, согласно (7), не может иметь определенной энергии. Во время взаимодействия электрона с фотоном нет ни электрона, ни фотона, а есть нечто единое целое без уточнения деталей.

**Пример 2.** Почему электрон, двигаясь ускоренно, не излучает и не падает на ядро, аннигилируя? Падение электрона на ядро означает существенное уменьшение неопределенности его координаты, так как размер атома  $\approx 10^{-8}$  см, а ядра  $\approx 10^{-12}$  см. Следовательно, импульс должен «размываться». То есть при падении электрона на ядро его импульс должен увеличиваться, для чего требуются затраты энергии. Расчеты показывают, что для такой «локализации» электрона нужна энергия порядка энергии связи нуклонов.

Среди физических толкований соотношения неопределённости можно выделить три уровня, которым в англоязычной литературе соответствуют три различных термина: uncertainty, indeterminateness, indeterminacy. Наиболее часто соотношения неопределённости (uncertainty relations) трактуют как ограничение на экспериментально достижимую точность измерения характеристик квантовых объектов, обусловленное неадекватностью классических приборов целям квантовых измерений.

Отношения неопределенности Гейзенберга — это теоретический предел точности любых измерений. Одновременно она указывает границу возможного использования классических представлений для описания событий в микромире. Любая частица (в общем смысле, например несущая дискретный электрический заряд) не может быть описана одновременно как «классическая точечная частица» и как волна. (Сам факт того, что какое-либо из этих описаний может быть справедливо, по крайней мере в отдельных случаях, называют корпускулярно-волновым дуализмом). Принцип неопределённости, в виде, первоначально предложенном Гейзенбергом, верен в случае, когда *ни одно* из этих двух описаний не является полностью и исключительно подходящим.

Другое толкование (indeterminateness) исходит из предпосылки, что соотношение неопределённости есть следствие свойства квантовых объектов, внутренне присущих им, независимо от несовершенства конкретных реализаций экспериментальных установок, предназначенных для измерения этих свойств. Таким внутренним свойством является корпускулярно-волновой дуализм квантовых объектов, т.е. неразделимое сочетание волновых и корпускулярных свойств, равно необходимых для их полного описания. С этой точки зрения, аналоги соотношения неопределённости хорошо известны, например, в акустике и оптике, задолго до создания квантовой механики.

Второе толкование соотношения неопределённости значительно шире и плодотворней первого, поскольку оно представляет собой не частное утверждение о границах уточнения характеристик квантовых объектов, а общий принцип неопределённости. Этот принцип является предпосылкой статистической интерпретации квантовой механики и важнейшим примером принципа дополнительности Бора (для этого расширительного толкования соотношение неопределённости часто используют термин indeterminacy). С точки зрения этого более общего принципа, соотношение неопределённости трактуется, как способ сохранить классические понятия для описания квантовых систем путём взаимного ограничения области их совместной применимости.

Соотношение неопределённости играет большую эвристическую роль, так как многие результаты задач, рассматриваемых в квантовой механике, могут быть получены и поняты на основе комбинации законов классической механики с соотношением неопределённости. Важный пример – проблема устойчивости атома. Рассмотрим эту задачу для атома водорода. Пусть электрон движется вокруг ядра (протона) по круговой орбите радиуса  $r$  со скоростью  $v$ . По закону Кулона сила притяжения электрона к ядру равна  $e^2/r^2$ , где  $e$  – заряд электрона, а центростремительное ускорение равно  $v^2/r$ . По второму закону Ньютона,  $mv^2/r = e^2/r^2$  ( $m$ -масса электрона), т.е. радиус орбиты  $r = e^2/mv^2$  может быть сколь угодно малым, если  $v$  достаточно велика. Но в квантовой механике должно выполняться соотношение неопределённости. Если допустить неопределённость скорости в пределах  $v$ , т.е. неопределённость импульса в пределах  $\Delta p = mv$ , то  $mvr \geq \hbar$ . Отсюда можно получить  $v \leq e^2/\hbar$  и  $r \geq \hbar^2/me^2$ . Следовательно, движение электрона по орбите с  $r \leq a_B = \hbar^2/me^2 \approx 0.5 \cdot 10^{-8}$  невозможно, т.е. электрон не может упасть на ядро – атом устойчив. Величина  $a_B$  и является радиусом атома водорода (Боровским радиусом). Ему соответствует максимально возможная энергия связи атома  $E_0 = -e^2/2a_B \approx -13,6$  эВ, определяющая его минимальную энергию – энергию основного состояния. Исходя из известных размеров атома водорода,  $a = \hbar^2/me^2$ , можно оценить характерную скорость

атомного электрона в основном состоянии:  $v \geq \Delta p / m \sim \hbar / m a \sim e^2 / \hbar$ , т.е.  $v/c \approx e^2 / \hbar c \approx \alpha \approx 1/137$  ( $m$  и  $e$  – масса и заряд электрона).

Таким образом, квантомеханические представления впервые дали возможность теоретически оценить размеры атома, выразив его радиус через мировые постоянные  $\hbar$ ,  $m$ ,  $e$ . Указанные соображения позволяют понять устойчивость других систем и оценить их характерные энергии.

Для некоммутирующих величин соотношение неопределённостей является частным случаем принципа дополнительности Бора.

*Дополнительности принцип – сформулированный Н. Бором принцип, согласно которому при экспериментальном исследовании микрообъекта могут быть получены точные данные либо об энергиях и импульсах, либо о поведении в пространстве и времени. Эти два взаимоисключающие картины – энергетически-импульсная и пространственно-временная, получаемые при взаимодействии микрообъекта с соответствующими измерительными приборами, «дополняют» друг друга.*

Всем микрообъектам присущи и волновые, и корпускулярные свойства, однако, они не являются ни волной, ни частицей в классическом понимании. Разные свойства микрообъектов не проявляются одновременно, они дополняют друг друга, только их совокупность характеризует микрообъект полностью. В этом заключается сформулированный Н. Бором принцип дополнительности (обобщение неравенства Гейзенберга). Можно условно сказать, что микрообъекты распространяются как волны, а обмениваются энергией как частицы.

Благодаря соотношению неопределённостей (16) возможны виртуальные переходы, происходящие с нарушением второго постулата Бора, т.е. с энергиями  $E \neq E_{ij} = E_i - E_j$ , где  $E_i$  и  $E_j$  – энергии начального ( $i$ ) и конечного ( $j$ ) состояния квантовой системы. При этом время жизни квантовой системы  $\Delta t$  определяется из соотношения (16), в котором  $\Delta E = |E - E_{ij}|$ . Виртуальные переходы могут происходить как с недостатком ( $\Delta E < 0$ ), так и с избытком ( $\Delta E > 0$ ) энергии  $E$  по сравнению с энергией идеального перехода  $E_{ij}$ , причём это имеет место как при испускании, так и при поглощении энергии квантовой системой. В частности, эта энергия может поглощаться и испускаться в виде фотонов. В этом случае виртуальное поглощение или испускание фотонов лежит в основе многофотонных процессов (например, многофотонной ионизации) в квантовых системах.

Для ограниченных в объёме квантовых систем из соотношения неопределённостей следует также существование энергии нулевых колебаний систем.

## 4. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

### 4.1 Уравнение Шрёдингера

Состояние квантовой системы описывается волновой функцией, квадрат модуля которой определяет величину данного состояния и, следовательно, вероятности для значений физических величин, его характеризующих.

*Волновая функция (амплитуда вероятности, вектор состояния) – в квантовой механике основная величина, описывающая состояние системы и позволяющая находить вероятности и средние значения характеризующих её физических величин. Квадрат амплитуды вероятностной функции равен вероятности данного состояния, поэтому волновая функция называется также амплитудой вероятности.*

Необходимость вероятностного подхода к описанию микрообъектов является важнейшей особенностью квантовой теории. В квантовой механике для характеристики состояний объектов в микромире вводится понятие волновой функции  $\Psi$  (пси-функции). Квадрат модуля волновой функции  $|\Psi|^2$  пропорционален вероятности нахождения микрочастицы в единичном объеме пространства. Конкретный вид волновой функции определяется внешними условиями, в которых находится микрочастица. Математический аппарат квантовой механики позволяет находить волновую функцию частицы, находящейся в заданных силовых полях. Безграничная монохроматическая волна де Бройля есть волновая функция свободной частицы, на которую не действуют никакие силовые поля.

Волновая функция подчиняется принципу суперпозиции, что и объясняет, в частности, дифракцию частиц.

*Суперпозиции принцип – относится к волновым функциям: если физическая система может находиться в состояниях, описываемых двумя (или несколькими) волновыми функциями, то она может также находиться в состоянии, описываемом любой линейной комбинацией этих функций (принцип суперпозиции состояний).*

Как уже упоминалось, вероятность обнаружения электрона в том или ином месте, описываемая квадратом модуля волновой функции  $|\Psi|^2$ . Волновая функция  $\Psi$  является решением основного уравнения квантовой механики – уравнения Шрёдингера.



**Шредингера уравнение** – основное динамическое уравнение нерелятивистской квантовой механики; позволяет определить возможные состояния системы, а также изменение состояния во времени.

**Уравнение Шредингера** - уравнение, связывающее пространственное распределение амплитуды вероятности с энергией частицы. Предложено Э.Шредингером в 1925 в качестве окончательного объяснения атомной структуры с помощью представлений о волновой функции. Играет в квантовой механике такую же важную роль, как уравнение второго закона Ньютона в классической механике. Его можно назвать уравнением движения квантовой частицы.

В квантовой механике вместо классических уравнений физики (например,  $F=ma$ ) вводится уравнение Шредингера. Открытие этого уравнения последовало за революционным предположением де Бройля, что не только свету, но и вообще любому веществу присущи волновые свойства. Исторически окончательной формулировке уравнения Шредингера предшествовал длительный период развития физики. Однако это уравнение не может быть выведено из более простых представлений. Оно является одним из фундаментальных законов физики, объясняющих физические явления. Квантовая теория, однако, не требует полного отказа от законов Ньютона, а лишь настаивает на отказе от абсолютной определенности в задании начальных условий. Следовательно, уравнение Шредингера должно согласовываться с законами Ньютона **в среднем**. Более того, если размер и масса частицы становятся макроскопическими, прогнозы квантовой и классической теорий совпадают, потому что неопределённый путь частицы становится близким к однозначной траектории. В начале 20-го века ученые пришли к выводу, что между предсказаниями классической теории и экспериментальными данными об атомной структуре существует ряд расхождений. Наиболее примечательным из этих расхождений было открытие того факта, что физические системы квантуются.

Как уже упоминалось в квантовой физике изначально вводится представления о вероятностном поведении частицы путем задания некоторой функции, называемой волновой и характеризующей вероятность местонахождения частицы. Затем выводится уравнение для этой функции. Отказавшись от описания движения частицы с помощью траекторий, получаемых из законов Ньютона, и определив вместо этого волновую функцию ( $\Psi$ ), необходимо ввести в рассмотрение уравнение, эквивалентное законам Ньютона и дающее рецепт для нахождения  $\Psi$  в частных физических задачах. Искомым уравнением будет уравнение Шредингера.

Волновая функция, описывающая движение свободной частицы с заданным значением импульса  $p$  имеет вид волны де Бройля

$$\Psi(r,t) = A \cdot \exp\left[\frac{i(pr - Et)}{\hbar}\right] \quad (17)$$

Линейное дифференциальное уравнение, которому удовлетворяет волна де Бройля имеет вид

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) \quad (18)$$

В этом легко убедиться, продифференцировав (8) по координатам  $x, y, z$  и времени  $t$ .

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} Et; \quad (19)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\hbar^2} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad (20)$$

Для свободной частицы

$$\frac{(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)}{2m} = E. \quad (21)$$

Соотношение (20) обычно записывается в виде  $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi$ , или

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (22)$$

где  $\hat{H}$  - оператор Гамильтона.

Уравнение (22) называется уравнением Шредингера

Для свободной частицы  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ .

Для частицы в потенциальном поле  $U(x,y,z)$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x, y, z). \quad (23)$$

Пусть волновая функция задана в N-мерном пространстве, тогда в каждой точке с координатами  $\vec{r}(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ , в определенный момент времени  $t$  она будет иметь вид  $\Psi(\vec{r}, t)$ . В таком случае уравнение Шрёдингера запишется в виде:

$$-\frac{\hbar}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}, t) + E_p(\vec{r})\Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t), \quad (24)$$

где  $\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  – постоянная Планка;  $m$  – масса частицы,  $E_p(\vec{r})$  – внешняя по отношению к частице потенциальная энергия в точке  $\vec{r}(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ ,  $\Delta$ - оператор Лапласа (или лапласиан), эквивалентен квадрату оператора набла, и в частном случае декартовых координат, имеет вид:

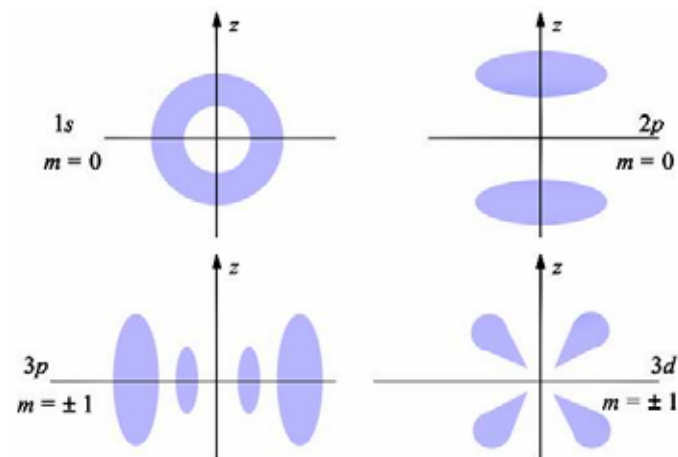
$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} \quad (25)$$

Перейдём теперь к трёхмерному пространству. Общее *временное уравнение Шредингера*, позволяющее определить в любой момент времени волновую функцию  $\Psi$  для частицы массы  $m_0$ , движущейся в силовом поле  $\vec{F} = -gradE_p$ , описываемом скалярной потенциальной функцией  $E_p(x, y, z, t)$ , имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\Psi + E_p\Psi \quad (26)$$

Здесь  $i = \sqrt{-1}$  – мнимая единица,  $\Delta$  – дифференциальный оператор Лапласа, который в декартовой системе координат имеет вид

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (27)$$



В общем случае в задачах квантовой механики дифференциальное уравнение в частных производных (16) должно решаться с учетом определенных начальных и граничных условий на волновую функцию.

**Рис. 8.** Радиальная электронная плотность вероятности в виде «облака», густота которого в разных точках пространства пропорциональна этой плотности вероятности.

Задать закон движения частицы в квантовой механике это значит определить значение волновой функции в каждый момент времени в каждой точке пространства. Уравнение Шредингера играет в квантовой механике такую же роль, как и второй закон Ньютона в классической механике. Самой поразительной особенностью квантовой физики оказался ее вероятностный характер. Вероятностный характер законов является фундаментальным свойством микромира. Квадрат модуля волновой функции, описывающей состояние квантовой системы, вычисленный в некоторой точке, определяет вероятность обнаружить частицу в данной точке.

Связь между квантовой и классической механикой аналогична связи между волновой и геометрической оптикой. В обоих случаях переход от одной теории к другой соответствует переходу от относительно больших длин волн (частицы или излучения) к малым длинам волн, если их сравнивать с характерным размером  $L$  области неоднородности силового поля или оптических свойств среды (**Табл. 2**).

**Табл. 2.** Классический и волновой подходы.

Волновая оптика	Квантовая механика
$\lambda \geq L$	$\lambda_B \geq L$
Геометрическая оптика	Классическая механика
$\lambda \ll L$	$\lambda_B \leq L$

В таком сравнении теорий траектория движения классической частицы является аналогом светового луча в геометрической оптике.

Форма уравнения Шрёдингера показывает, что относительно времени его решение должно быть простым, поскольку время входит в это уравнение лишь через первую производную в правой части. Действительно, частное решение для стационарного состояния, когда  $E_p$  не является функцией времени, можно записать в виде:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) e^{(-\frac{2\pi i}{h})Et}, \quad (28)$$

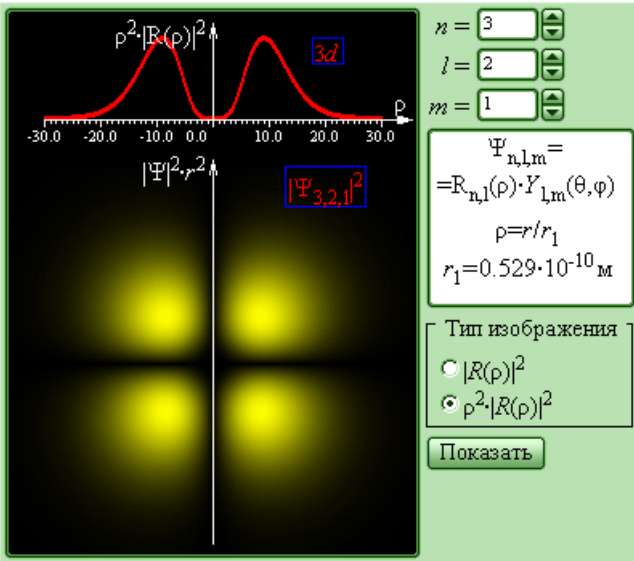
где функция  $\Psi(\vec{r})$  должна удовлетворять уравнению:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}) + E_p(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (29)$$

которое получается из уравнения Шрёдингера при подстановке в него указанной выше формулы для  $\Psi$ . Заметим, что это уравнение вообще не содержит времени; в связи с этим оно называется стационарным уравнением Шрёдингера (уравнение Шрёдингера, не содержащее времени).

Выражение (28) является лишь частным решением зависящего от времени уравнения Шрёдингера, общее решение представляет собой линейную комбинацию всех частных решений вида (28). Зависимость

функции  $\Psi_p(\vec{r})$  от времени проста, но зависимость ее от координаты не всегда имеет элементарный вид, так как уравнение (29) при одном выборе вида потенциальной функции  $E_p(\vec{r})$  совершенно отличается от того же уравнения при другом выборе этой функции. В действительности уравнение (29) может быть решено аналитически лишь для небольшого числа частных типов функции  $E_p(\vec{r})$ .



**Рис. 9.** Пример квантово-механического расчёта атома водорода

важное значение имеет интерпретация величины  $E$  в уравнении (28). Она производится следующим путём: временная зависимость функции  $\Psi(\vec{r}, t)$  в уравнении (28) имеет экспоненциальный характер, причём коэффициент при  $t$  в показателе экспоненты выбран так, что правая часть уравнения (29) содержит просто постоянный множитель  $E$ . В левой же части уравнения (29) функция  $\Psi$  умножается на потенциальную энергию  $E_p(\vec{r})$ .

Следовательно, из соображений размерности вытекает, что величина  $E$  должна иметь размерность энергии. Единственной величиной с размерностью энергии, которая постоянна в механике, является полная (сохраняющаяся) энергия системы; таким образом, можно предполагать, что  $E$  представляет собой полную энергию. Согласно физической интерпретации уравнения Шрёдингера,  $E$  действительно является полной энергией частицы при движении, описываемом функцией  $\Psi(\vec{r}, t)$ .

В рамках квантовой механики, образ атома водорода представляется в виде облака плотности вероятности нахождения электрона в заданной точке пространства. Некоторые квантовые состояния атома водорода, описываемых волновыми функциями (решениями уравнения Шрёдингера), представлены на **Рис. 9**.

## 4.2 Волновая функция

Наличие у частицы волновых свойств приводит к тому, что в квантовой физике ей сопоставляется волновая функция  $\Psi(x, y, z, t)$ .

**Физический смысл волновой функции.** Величина  $|\Psi(x, y, z, t)|^2 dV$  пропорциональна вероятности того, что частица будет обнаружена в момент времени  $t$  в объеме  $dV$  в окрестности точки  $(x, y, z)$ .

Волновая функция системы невзаимодействующих частиц  $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n, t)$  связана с одночастичными волновыми функциями  $\Psi_i(r_i, t)$  соотношением

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n, t) = \Psi_1(r_1, t) \cdot \Psi_2(r_2, t) \cdot \dots \cdot \Psi_n(r_n, t). \quad (30)$$

### Свободное движение частицы

Волновая функция свободно движущейся частицы с энергией  $E$  и импульсом  $p$  имеет вид

$$\Psi(r, t) = A \exp[i(kr - \omega t)] = A \exp[i(pr - Et)/\hbar]. \quad (31)$$

Константа  $A$  может быть найдена из условия нормировки волновой функции

$$A = (2\pi\hbar)^{-3/2}. \quad (32)$$

Т.е. в тех случаях, когда частица находится в области пространства, где действующие на нее силы равны нулю (свободное движение), энергия частицы может принимать любые значения. Энергетический спектр свободно движущейся частицы непрерывный.

### Частица в прямоугольной яме с бесконечными стенками

Если область пространства, в которой может находиться частица, ограничена, возникает дискретный спектр энергий. Рассмотрим это на примере одномерной прямоугольной ямы с бесконечными стенками

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq x \leq a, \\ \infty & \text{при } 0 > x > a. \end{cases} \quad (33)$$

Частица всегда находится в области  $0 \leq x \leq a$ . Вне её  $\Psi = 0$ . Запишем уравнение Шредингера для одномерного случая

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi. \quad (34)$$

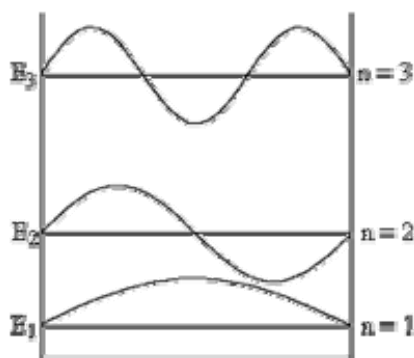
Его решение

$$\Psi = A \sin kx + B \cos kx, \quad (35)$$

где  $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$ . Из граничных условий и условий непрерывности имеем

$$A \sin ka = 0. \quad (36)$$

**Рис.10.** Стоячие волны в потенциальной яме.



Из (26) получим

$$ka = n\pi, \quad n=1, 2, \dots, \quad (37)$$

т.е. внутри ямы устанавливаются стоячие волны, а энергия состояний принимает дискретные значения

$$E_n = p^2/2m = \hbar k^2/2m = \hbar^2 \pi^2 n^2 / (2ma^2). \quad (38)$$

Энергии состояний растут квадратично от  $n$ .

Каждому значению энергии соответствует волновая функция, которую с учетом условия нормировки

$$\int_0^a |\Psi(x)|^2 dx = \int_0^a \left| A \sin \frac{n\pi x}{a} \right|^2 dx = 1, \quad (39)$$

можно записать в виде

$$\Psi_n = (2/a)^{1/2} \sin (n\pi x/a) \quad (40)$$

В отличие от классической частицы, квантовая частица в прямоугольной яме не может иметь энергию  $E < \hbar^2 \pi^2 / (2ma^2)$ .

### Частица в потенциале гармонического осциллятора

Потенциал гармонического осциллятора (так же, как и в предыдущем примере рассмотрим одномерный случай)

$$\Psi_n = kx^2/2 = m\omega_0^2 x^2/2. \quad (41)$$

где  $\omega_0 = (k/m)^{1/2}$  - собственная частота колебаний гармонического осциллятора. Решение уравнения Шредингера для этого потенциала можно записать в виде

$$\Psi_n = h_n(x) e^{-b(x)}, \quad (42)$$

где  $h_n(x)$  - полиномы степени  $n$ ,  $b(x) = (km)^{1/2} x^2 / 2\hbar$ . Спектр значений энергий имеет вид

$$E_n = \hbar\omega_0(n + 1/2), \quad n = 0, 1, \dots \quad (43)$$

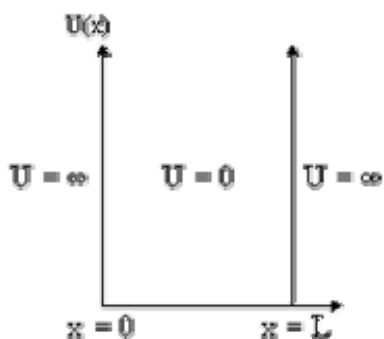
Энергетический спектр гармонического осциллятора эквидистантный - уровни находятся на одинаковом расстоянии друг от друга.

### 4.3 Потенциальная яма

Частица массы  $m$  находится в одномерной потенциальной яме бесконечной глубины (Рис. 11). Потенциальная энергия  $U$  удовлетворяет следующим граничным условиям

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \quad x > L \\ 0, & 0 \leq x \leq L \end{cases} \quad (44)$$

**Рис.11.** Частица в одномерной потенциальной яме бесконечной глубины.





При таких граничных условиях частица находится внутри потенциальной ямы  $0 \leq x \leq L$  и не может выйти за ее пределы, т.е.

$$\Psi(x) = 0, \quad x < 0, \quad x > L \quad (45)$$

Условие нормировки

$$\int_0^L \Psi^* \cdot \Psi dx = 1. \quad (46)$$

Используя стационарное уравнение Шредингера для случая  $U=0$ , получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi \quad (47)$$

или

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + a^2\Psi = 0 \quad (48)$$

где

$$a^2 = 2mE/\hbar^2. \quad (49)$$

Уравнение (37) описывает положение частицы внутри потенциальной ямы. Оно имеет решение

$$\Psi(x) = Ae^{+iax} + Be^{-iax}, \quad (50)$$

представляющее собой суперпозицию двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях вдоль оси  $x$ .

Постоянные  $A$  и  $B$  находятся из граничных условий

$$A + B = 0 \text{ при } x = 0 \text{ т.е. } B = -A. \quad (51)$$

Следовательно

$$\Psi(x) = A(e^{+iax} - e^{-iax}) = 2iA \sin ax. \quad (52)$$

Условие  $\Psi(L) = 0$  дает

$$2ia \sin aL = 0. \quad (53)$$

Отсюда

$$aL = n\pi, \text{ следовательно, и } a = n\pi/L, \text{ где } n = 1, 2, 3, \dots \quad (54)$$

Подставляя полученное значение  $a$  в соотношение (48), получим соотношение для энергии частицы в бесконечной прямоугольной яме

$$E_n = \hbar^2 a^2 / 2m = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2, \text{ где } n = 1, 2, 3, \dots \quad (55)$$

Волновые функции (50) имеют вид

$$\Psi_n(x) = 2iA \sin(n\pi x/L); \quad \Psi_n^*(x) = -2iA \sin(n\pi x/L). \quad (56)$$

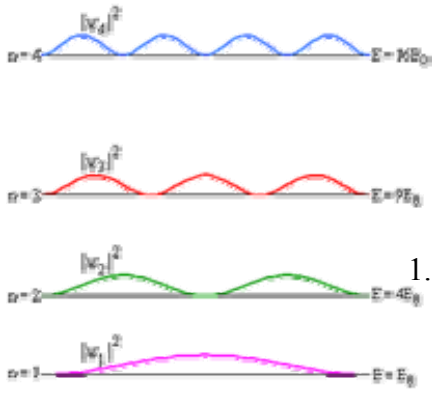
Константу  $A$  можно получить из условия

$$\int_0^L \Psi_n^*(x) \cdot \Psi_n(x) dx = \int_0^L 4A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 2A^2 \left[ x - \frac{L}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right) \right]_0^L = 2A^2 L = 1. \quad (57)$$

Нормированные волновые функции и собственные значения энергии для различных состояний приведены в Табл. 3.

**Табл. 3.** Нормированные волновые функции и собственные значения энергии.

n	Собственные функции $\Psi$	Плотности вероятности $\Psi\Psi^*$	Собственные значения энергии
1	$i(2/L)^{1/2} \sin(\pi x/L)$	$(2/L) \sin^2(\pi x/L)$	$\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$
2	$i(2/L)^{1/2} \sin(2\pi x/L)$	$(2/L) \sin^2(2\pi x/L)$	$4\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$
3	$i(2/L)^{1/2} \sin(3\pi x/L)$	$(2/L) \sin^2(3\pi x/L)$	$9\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$
$n$	$i(2/L)^{1/2} \sin(n\pi x/L)$	$(2/L) \sin^2(n\pi x/L)$	$n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$



**Рис.12.** Вероятность обнаружения частицы в различных квантовых состояниях.

На **Рис. 12** показаны плотности вероятности обнаружения частицы в различных квантовых состояниях. Таким образом, для бесконечной одномерной потенциальной ямы имеем следующее.

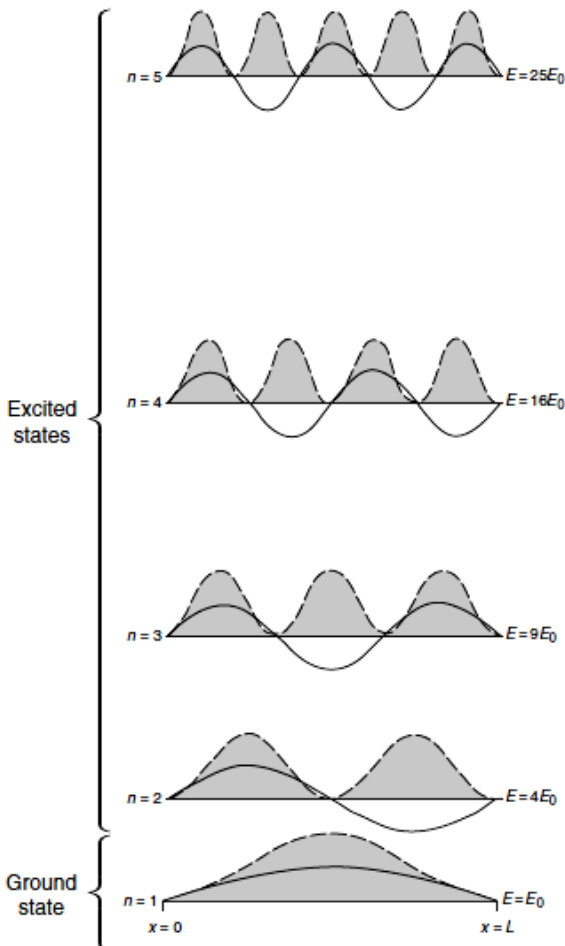
1. Энергия частицы принимает определенные дискретные значения. Обычно говорят, что частица находится в определенных энергетических состояниях.
2. Частица может находиться в каком-то одном из множества энергетических состояний.
3. Частица не может иметь энергию равную нулю.
4. Каждому значению энергии  $E_n$  соответствует собственная волновая функция  $\Psi_n$ , описывающая данное состояние.
5. Для собственной функции  $\Psi_1(x)$  вероятность обнаружить частицу в точке  $x = L/2$  максимальна. Для состояния  $\Psi_2(x)$  вероятность обнаружения частицы в этой точке равна 0.

**Пример.** Пусть нейтрон находится в одномерной потенциальной яме, размеры которой сравнимы с размером ядра,  $10^{-14}$  м. Вопросы: а) Чему равна энергия первого возбужденного состояния? б) Чему равна вероятность нахождения нейтрона в пределах области, соответствующей 20% ширине ямы, расположенной между  $0,4 \cdot 10^{-13}$  м и  $0,6 \cdot 10^{-14}$  м в четвертом возбужденном состоянии?

Решение. 1.  $E_0$  (энергия в основном состоянии) =  $\frac{\hbar^2 \pi^2 (n)^2}{2mL^2} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Джс})^2 (3,14)^2 (1)^2}{2(1,66 \cdot 10^{-27} \text{ кг})(10^{-14} \text{ м}^2)} = 3,3 \cdot 10^{-13} \text{ Дж} = 2,0 \text{ МэВ}$ .

Энергия первого возбужденного состояния,  $n=2$ , равна  $4E_0$ , а энергетическое пространство между первым возбужденным состоянием и основным состоянием равно  $3E_0=6 \text{ МэВ}$ .

2. Вероятность =  $\int_{x_1}^{x_2} \Psi^2(x) dx = \frac{2}{L} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\sin^2 5\pi x}{L} dx = \left( \frac{x}{L} - \frac{1}{5\pi} \sin \frac{5\pi x}{L} \right)_{x_1}^{x_2} = 0,20$  - результат, представленный на **Рис. 13** под  $\psi^2$  кривой.



**Рис. 13.** Разрешённые энергетические уровни в одномерной потенциальной яме. Волновая функция представлена сплошной линией, а плотность вероятности – заштрихованной площадью.

В случае гармонического осциллятора потенциальная энергия  $U$  имеет вид

$$U = kx^2/2. \quad (58)$$

Стационарное уравнение Шредингера для гармонического осциллятора имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{kx^2}{2} \Psi = E\Psi. \quad (59)$$

Также как и в случае прямоугольной потенциальной ямы наблюдается дискретный спектр энергий состояний

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega = (n + 1/2)\hbar\omega, \text{ где } n = 0, 1, 2, \dots, \quad (60)$$

где  $\omega = (k/m)^{1/2}$ . Однако в отличие от прямоугольной ямы, спектр энергий эквидистантный. Каждому энергетическому состоянию соответствует волновая функция, описываемая полиномом Эрмита  $H_n$ .

$$\Psi_m = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi} 2^n n!}} = H_n(ax) e^{-a^2 x^2/2}, \quad (61)$$

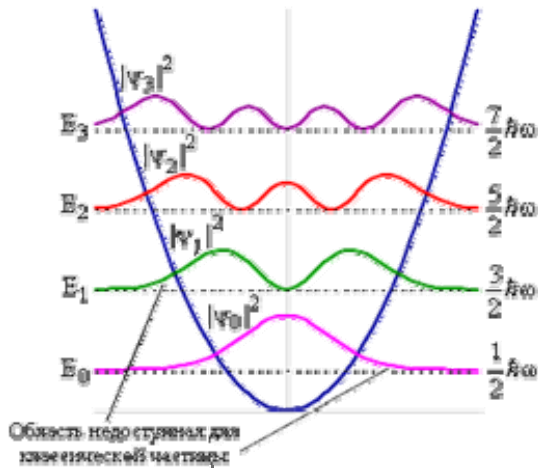
$$H_n = (-1)^n e^{\zeta^2} \frac{d^n}{d\zeta^n} (e^{-\zeta^2}), \quad (62)$$

где  $a^2 = 4\pi^2 m\nu/h$ ,  $\zeta = ax$ . В **Табл. 4** приведены собственные значения энергии  $E_n$  и нормированные собственные функции гармонического

осциллятора  $\Psi_n$

**Табл. 4.** Собственные значения энергии и функции гармонического осциллятора.

n	Собственные значения энергии $E_n$	Нормированные собственные функции $\Psi_n$
0	$E_0 = h\nu/2$	$\Psi_0 = \left(\frac{a}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-0.5a^2x^2}$
1	$E_1 = 3h\nu/2$	$\Psi_1 = \left(\frac{a}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} 2axe^{-0.5a^2x^2}$
2	$E_2 = 5h\nu/2$	$\Psi_2 = \left(\frac{a}{8\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} (4a^2x^2 - 2)e^{-0.5a^2x^2}$
3	$E_3 = 7h\nu/2$	$\Psi_3 = \left(\frac{a}{48\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} (8a^3x^3 - 12)e^{-0.5a^2x^2}$
n	$E_n = (n+1/2)h\nu$	$\Psi_n = \left(\frac{a}{2^2\sqrt{\pi}n!}\right)^{1/2} H_n(ax)e^{-0.5a^2x^2}$



На **Рис. 14** показана плотность распределения волновой функции гармонического осциллятора.

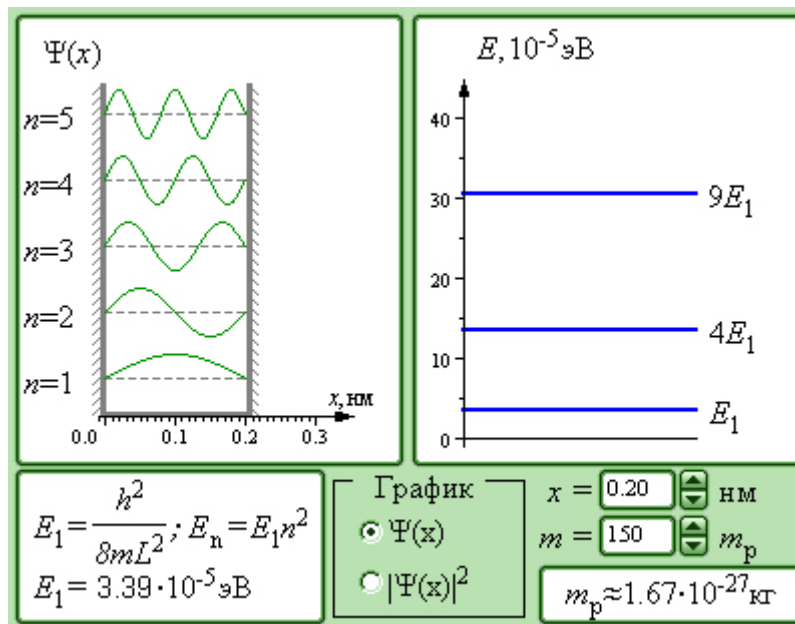
Классический осциллятор не может выйти за пределы значений  $x$ , в которых потенциальная энергия равна энергии  $E_n$  для данного значения квантового числа  $n$ . В квантовом случае ситуация другая - существует отличная от нуля вероятность обнаружить частицу за пределами потенциальной ямы, т.е. частица может проникать на небольшое расстояние за стенку барьера.

**Рис. 14.** Плотность распределения волновой функции гармонического осциллятора.

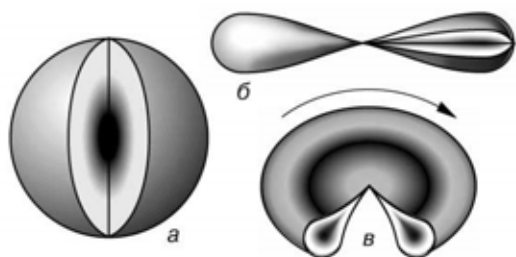
## 5. ПРИНЦИП ПАУЛИ

В квантовых системах действуют два типа сил: электромагнитные и ядерные. При равенстве нулю заряда частиц, они, тем не менее, взаимодействуют, и взаимодействуют сильно. Важно, что при этом состояние двух одинаковых частиц не есть произвольное состояние каждой из частиц. Состояние должно удовлетворять *принципу неразличимости*. Квантовые частицы неразличимы в принципе. Это утверждение сильнее, чем утверждение о тождественности частиц в классической физике. В ньютоновской механике частица движется по определенной траектории. За ней можно следить, ее не спутаешь с другой, даже если они одинаковы. В квантовой механике у частицы нет определенной траектории. Возможны квантовые скачки, можно с определенной вероятностью обнаружить частицу на первый взгляд в неожиданном месте - непрерывно следить за ней невозможно.

В квантовой механике частицы описываются с помощью волновых функций, позволяющих вычислить лишь вероятность нахождения частицы в данной точке пространства. Если волновые функции нескольких тождественных частиц перекрываются,



то невозможно определить, какая из частиц находится в данной точке. Т.к. физический смысл имеет квадрат модуля волновой функции, состояние не изменится при изменении знака волновой функции при перестановке двух тождественных частиц. Принцип тождественности частиц требует, чтобы при перестановке двух тождественных частиц волновая функция либо изменяла знак (**антисимметричное состояние**), либо не меняла знака (**симметричное состояние**).



**Рис. 15.** Распределение вероятности нахождения электрона для атома водорода в трех возбужденных состояниях. Представлены поверхности равной вероятности. Ретушью в вырезах показано изменение вероятности в поперечном сечении.

Рассмотрим статистику для двух частиц  $a$  и  $b$ , находящихся в двух различных состояниях  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  -

$$\Psi_1(a), \Psi_1(b), \Psi_2(a), \Psi_2(b). \quad (63)$$

Из этих функций можно построить две несимметризованные функции

$$\Psi_1(a,b) = \Psi_1(a)\Psi_1(b), \quad (64)$$

$$\Psi_2(a,b) = \Psi_2(a)\Psi_2(b). \quad (65)$$

Состояния  $\Psi_1(a,b)$  и  $\Psi_2(a,b)$  соответствуют одной и той же энергии. Из функций  $\Psi_1(a,b)$  и  $\Psi_2(a,b)$  можно построить две симметризованные комбинации, отвечающих той же энергии. Симметричную комбинацию  $\Psi_2(a)\Psi_2(b)$

$$\Psi_{\text{сим}} = \Psi_1(a)\Psi_1(b) + \Psi_2(a)\Psi_2(b) \quad (66)$$

и антисимметричную комбинацию  $\Psi_2(a)\Psi_2(b)$

$$\Psi_{\text{антисим}} = \Psi_1(a)\Psi_1(b) - \Psi_2(a)\Psi_2(b). \quad (67)$$

Важным квантово-механическим свойством системы двух или более идентичных частиц является влияние на волновую функцию обмена координатами двух частиц. Если при обмене пространственными и спиновыми координатами никаких изменений в волновой функции не происходит, то говорят, что волновая функция симметрична и частицы подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна. Если при обмене пространственными и спиновыми координатами волновая функция меняет знак, то волновая функция называется несимметричной и частицы подчиняются статистике Ферми-Дирака. «Статистики» сильно влияют на свойства ансамблей частиц. Частицы с полуцелыми спинами, такие как нейтроны, протоны и электроны являются фермионами и подчиняются статистике Ферми-Дирака. Они имеют несимметричные волновые функции и поэтому подчиняются принципу Паули. (Никакие две частицы не могут иметь одинаковые значения величин квантовых чисел,  $m$ ,  $l$ ,  $m_l$ ,  $s$  и  $m_s$ . Фотоны и другие частицы и с целыми спинами, такие как  $p$ -мезон являются бозонами. Они подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна, имеют симметричные волновые функции и не подчиняются принципу Паули.



Симметричными волновыми функциями описываются частицы с целым спином - **бозоны** (пионы, фотоны, альфа-частицы, ...). (На связь между симметрией волновой функции и спином впервые указал Паули). Бозоны подчиняются статистике Бозе - Эйнштейна. В одном квантовом состоянии может одновременно находиться неограниченное количество тождественных бозонов. Антисимметричными волновыми функциями описываются частицы с полуцелым спином – **фермионы** (протоны, нейтроны, электроны, нейтрино, ...). Фермионы подчиняются статистике Ферми - Дирака. Для фермионов справедлив принцип Паули - Два тождественных фермиона не могут одновременно находиться в одном и том же состоянии. Если  $a = b$  и  $\Psi_1 = \Psi_2$ , то при перестановке местами  $a$  и  $b$  антисимметричная функция  $\Psi_{\text{антисим}} = 0$ . Принцип Паули определяет строение электронных оболочек атомов, заполнение нуклонных состояний в ядрах и т.д.

Описывая движение двух или нескольких квантовых частиц, нужно использовать условия, которые обеспечивают выполнение принципа неразличимости. Свою неразличимость частицы проявляют по-разному. Как именно, зависит от их спина - целый он (в частности, нулевой) или полуцелый. Если частицы - бозоны, то есть имеют нулевой или целый спин, то функция, описывающая состояние двух частиц, при перестановке частиц местами вовсе не меняется. Если же частицы - фермионы с полуцелым спином, функция, описывающая состояние двух частиц, при перестановке частиц меняет знак. (В квантовой теории перемена частиц местами - чисто математическая процедура: в функции, описывающей их состояние, меняют местами аргументы, относящиеся к разным частицам). Это различие кардинально влияет на поведение совокупностей квантовых частиц - как принято говорить, на их статистику (подробнее см. лекцию по элементарным частицам). В статистике Бозе-Эйнштейна любому количеству бозонов ничто не мешает скапливаться в одном состоянии. Именно это их свойство позволило получить "пятое состояние вещества" - так называемый бозе-эйнштейновский конденсат, когерентную материю, комок атомов в одном квантовом состоянии. А число фермионов в каждом состоянии либо 0, либо 1. Третьего не дано! Для фермионов осуществляется запрет: две одинаковые частицы не могут находиться в одном и том же состоянии. Этот запрет в 1924 сформулировал Вольфганг Паули (1900-1958). Запрет называется *принципом Паули*. Состояние электрона в любом атоме определяют четыре числа: главное квантовое число  $n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ); орбитальный момент количества движения  $l$  ( $l = n - 1$ ); проекция момента на ось квантования  $l_z$  (таких проекций  $2l + 1$ ); проекция спина на ось квантования (их две - либо  $+1/2$ , либо  $-1/2$ ). Принцип Паули запрещает электронам иметь четыре совпадающие характеристики. Этот запрет диктует закон, по которому построена электронная оболочка атома.

*Принцип Паули (принцип запрета) — один из фундаментальных принципов квантовой механики, согласно которому два тождественных фермиона не могут одновременно находиться в одном квантовом состоянии.*

Принцип был сформулирован для электронов Вольфгангом Паули (1925) в процессе работы над квантомеханической интерпретацией аномального эффекта Зеемана и в дальнейшем распространён на все частицы с полуцелым спином. Полное обобщённое доказательство принципа было сделано им в 1940 в рамках релятивистской квантовой механики: волновая функция системы фермионов является антисимметричной относительно их перестановок, поведение систем таких частиц описывается статистикой Ферми-Дирака.

Принцип Паули определяет строение электронных оболочек атомов, заполнение нуклонных состояний в ядрах и т.д.

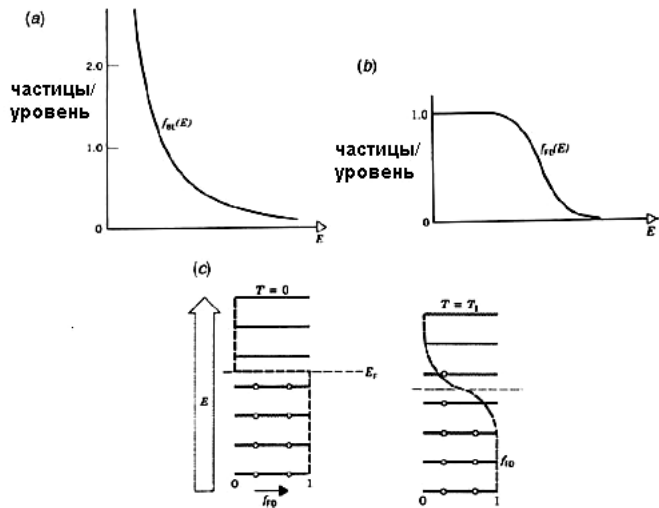
## 6. РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Выше мы упоминали, что элементарные частицы делятся на фермионы, подчиняющиеся распределению Ферми-Дирака, и бозоны, подчиняющиеся распределению Бозе-Эйнштейна. Попытаемся пояснить, что это за статистические распределения и как они соотносятся с более известным в среде химиков распределением Максвелла-Больцмана.

Различие между фермионами и бозонами отражается на том, как они занимают набор состояний, особенно при разных температурах. Рассмотрим систему, показанную на **Рис. 16**.

В нулевой температуре ( $T = 0$ ), бозоны пытаются занять самые низкие энергетические состояния (конденсат Бозе-Эйнштейна) в то время как фермионы занимают одно квантовое состояние). При высоких температурах распределения подобны и приближаются к распределению Максвелла Больцмана.

Под функцией распределения  $f(E)$  будем понимать вероятность того, что частица находится в энергетическом состоянии  $E$ . Функция распределения - обобщение идеи распределения дискретной величины случай, где энергию можно рассматривать как непрерывную переменную. В природе наиболее широко распространены три распределения. Рассмотрим их более подробно.

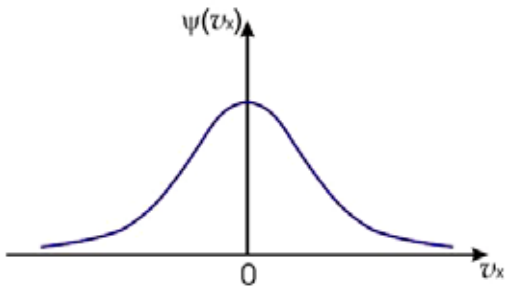


**Рис. 16.** а) Распределение Бозе-Эйнштейна, б) Распределение Ферми-Дирака и с) заполненные фермионами уровни при  $T=0$  и  $T=T_1>T_0$ . Пунктир показывает энергии Ферми  $E_F$ .

### 6.1 Распределение Максвелла-Больцмана

Распределение Максвелла - распределение вероятности, встречающееся в физике и химии. Оно лежит в основании кинетической теории газов, которая объясняет многие фундаментальные свойства газов, включая давление и диффузию. Также оно может быть выражено

как дискретное распределение по множеству дискретных уровней энергии, или как непрерывное распределение по некоторому континууму энергии. Установлено Дж.Маквеллом в 1859. Используя распределение Максвелла Л.Больцман предложил в 1871 статистический метод описания физических систем, содержащих большое число невзаимодействующих частиц, движущихся по законам классической механики (т.е. классического идеального газа).



**Рис. 17.** Распределение Максвелла.

Распределение вероятностей, характеризующая вероятность того, что частица имеет данный импульс и находится в данном элементе объема, носит название распределение Максвелла — Больцмана.

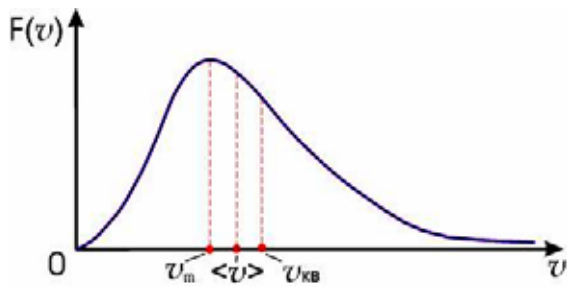
Распределение Максвелла-Больцмана – классическая функция распределения энергии между **идентичными**, но **различимыми** частицами.

Кроме того, постулируется:

- - Конкретное состояние может вместить любое число частиц.
- - В тепловом равновесии, распределение частиц среди доступных энергетических состояний - самое вероятное, определяемое всей доступной энергией системы и общим количеством частиц.
- - Все конкретные состояния системы равновероятны.

Основная идея здесь – малая вероятность того, что некая частица получит энергию намного выше средней (т. е. намного больше своей доли). Энергии ниже средней предпочтительны, потому что существует больше способов их достижения. Если одна частица, например, получит энергию в 10 раз выше средней, то это уменьшит возможность распределения остатка энергии. Такое событие маловероятно, потому что вероятность занятия данного состояния пропорциональна числу способов, которыми оно может быть достигнуто.

Согласно теории вероятности, распределение Максвелла-Больцмана можно рассматривать как произведение вероятностей двух независимых событий - вероятность данного значения импульса и данного положения частицы. Первая из них – распределение Максвелла, вторая – распределение Больцмана. Каждое из них нормировано на единицу. Здесь важно, что вероятность данного значения импульса совершенно не зависит от положения молекулы и, наоборот, вероятность положения молекулы не зависит от её импульса. Это значит что распределение частиц по импульсам (скоростям) не зависит от поля, другими словами остается тем же самым от точки к точке пространства, в котором заключен газ. Меняется лишь вероятность обнаружения частицы.



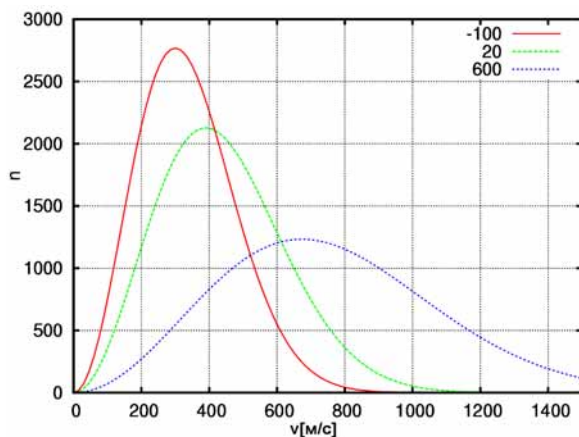
**Рис. 18.** Распределение Максвелла по абсолютным значениям скоростей частиц.

Распределение применимо к идентичным, но различным частицам, при условии отсутствия квантовых эффектов. Точнее, оно описывает распределение по скоростям частиц макроскопической физической системы, находящейся в статическом равновесии, при условии, что движение молекул подчиняется законам классической механики (например, классический идеальный разреженный газ). Этим распределением можно описать распределение энергий частиц, а также скоростей, импульсов, и модуля импульсов частиц (например, молекул).

Функция распределения частиц газа по скоростям:

$$f(v) = \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp\left( -\frac{mv^2}{2kT} \right) \quad (68)$$

где  $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ .



Функция  $f(v)$  называется распределением Максвелла. Качественно вид этой функции (**Рис. 19**) совпадает с нормальным законом распределения Гаусса, описывающим распределение ошибок измерений случайной величины. Уравнение (68) может быть представлено в форме:

$$y = \varphi(x) = A \exp(-\alpha x^2) \quad (69)$$

где  $A$  и  $\alpha$  - константы.

**Рис. 19.** Распределение частиц по скоростям при различных температурах (Распределение Максвелла-Больцмана).

Функция плотности вероятности для модуля скорости, называется функцией распределения Максвелла по абсолютным значениям

скоростей:

$$F(v) = 4\pi v^2 \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp\left( -\frac{mv^2}{2kT} \right) \quad (70)$$

Она выражает вероятность того, что величина скорости имеет значения от  $v$  до  $v+dv$ .

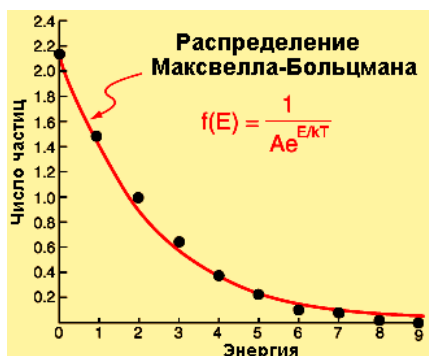
Максимум этой функции соответствует наиболее вероятному значению скорости молекул газа  $v_m$ :

$$v_m = \sqrt{\frac{2kT}{m}} \quad (71)$$

Характерным параметром распределения Максвелла является так называемая среднеквадратичная скорость:

$$v_{rms} = \sqrt{\langle v^2 \rangle}, \text{ где } \langle v^2 \rangle \quad (72)$$

Средняя скорость частиц:



**Рис. 20.** Распределение частиц по энергиям.

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = \sqrt{\frac{8TR}{\mu}}, \quad (73)$$

где  $m$  - молекулярная масса газа,  $T$  - термодинамическая температура,  $k$  - постоянная  $k=1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К - постоянная Больцмана и  $\mu$  - молекулярная масса.

Среднеквадратичная скорость молекул

$$v_{kv} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} \quad (74)$$

Полученные значения скоростей численно отличаются друг от друга на величину, меньшую, чем их значения, причем  $v_m < \langle v \rangle < v_{kv}$ .



**Рис. 21.** Функция, описывающая распределение частиц по энергиям в предположении реализации закона Максвелла-Больцмана.

Кроме функции распределения по абсолютным значениям скорости  $F(v)$  применяется функция распределения по значениям кинетической энергии поступательного движения молекул  $F_E(E_K)$ , характеризующая вероятность попадания значений кинетической энергии  $E_K$  в интервал  $dE_K$ :

$$F_E(E_K) = \frac{2\pi}{(\pi kT)^{3/2}} \sqrt{E_K} \exp\left(-\frac{E_K}{kT}\right) \quad (75)$$

Как распределение энергии, распределение Максвелла соответствует самому вероятному распределению энергии, в столкновительно-доминируемой системе, состоящей из большого количества не взаимодействующих частиц.

Средняя кинетическая энергия поступательного движения частиц:

$$\langle E \rangle = \frac{m \langle v^2 \rangle}{2} = \frac{3}{2} kT \quad (76)$$

Наиболее вероятное значение кинетической энергии поступательного движения частиц, находящихся в равновесном состоянии:

$$E = \frac{kT}{2} \quad (77)$$

Наиболее вероятное значение кинетической энергии поступательного движения в три раза меньше среднего значения этой энергии частицы.

Отметим, что все рассмотренные здесь распределения справедливы только для равновесного состояния термодинамической системы. Вследствие достаточно общего метода их получения, они применимы не только для газов, но и для любых систем, движение микрочастиц которых описывается уравнениями классической механики.

## 6.2 Распределение Бозе-Эйнштейна

Статистика Бозе — Эйнштейна — квантовая статистика, применяемая к системам частиц с нулевым или целочисленным спином; предложена в 1924 индийским физиком С.Бозе для квантов света; развита А.Эйнштейном для молекул идеальных газов. Характерная особенность - в одном и том же состоянии может находиться любое число одинаковых частиц (в противоположность статистике Ферми-Дирака для частиц с полужелым спином, согласно которой каждое состояние может быть занято не более чем одной частицей). Для сильно разреженных газов (как и статистика Ферми — Дирака) переходит в статистику Максвелла-Больцмана.

Формула Бозе-Эйнштейна для распределения по энергиям можно представить в виде:

$$f(E) = \frac{1}{A * e^{E/kT} - 1}, \quad (78)$$

где  $A$  — нормирующий множитель.

Следствием статистики Бозе-Эйнштейна является конденсат Бозе-Эйнштейна – агрегатное состояние материи, основу которой составляют охлаждённые до температур близких к нулю бозоны (сингулярное



квантовое состояние). Бозоны, которыми являются, например, и отдельные элементарные частицы — фотоны, и целые атомы, такие как гелий – 4, могут находиться друг с другом в одинаковых квантовых состояниях.

Одним из свойств конденсата является самопроизвольное вытекание сильноохлаждённой жидкости из сосуда, в который она помещена. Это явление является непосредственным проявлением законов квантовой механики, согласно которым система может получать энергию только дискретно. Если система находится при настолько низких температурах, что пребывает в наинизшем энергетическом состоянии, то она уже не в состоянии уменьшить свою энергию даже за счёт трения. Без трения жидкость легко преодолевает гравитационное притяжение благодаря молекулярному сцеплению жидкости со стенками сосуда, и занимает наиболее выгодное положение — вне сосуда.

В таком переохлаждённом состоянии большее число атомов оказывается в своих минимально возможных квантовых состояниях и квантовые эффекты начинают проявляться на макроскопическом уровне. Один из таких эффектов - самопроизвольное вытекание низкотемпературной жидкости из сосуда, в который она помещена. Это явление является непосредственным проявлением законов квантовой механики, согласно которым система может получать энергию только дискретно. Если система находится при настолько низких температурах, что пребывает в наинизшем энергетическом состоянии, то она уже не в состоянии уменьшить свою энергию даже за счёт трения. Без трения жидкость легко преодолевает гравитационное притяжение благодаря молекулярному сцеплению жидкости со стенками сосуда, и занимает наиболее выгодное положение — вне сосуда.

Квантовый переход возникает ниже критической температуры, которая для однородного трёхмерного газа, состоящего из невзаимодействующих частиц без каких-либо внутренних степеней свободы, определяется формулой

$$T_c = \left( \frac{n}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2\pi m k_B}, \quad (79)$$

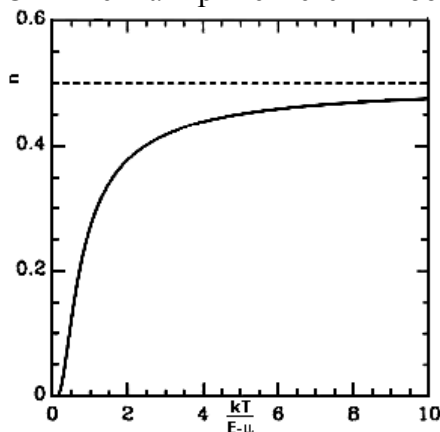
где:  $T_c$  - критическая температура,  $n$  - концентрация частиц,  $m$  - масса,  $h$  - постоянная Планка,  $k_B$  - постоянная Больцмана,  $\zeta$ - функция Римана,  $\zeta(3/2)=2,6124$ .

Конденсат Бозе-Эйнштейна теоретически предсказан в 1925, первый конденсат был получен Э.Корнеллом и К.Виманом (США) в 1995.

### 6.3 Распределение Ферми-Дирака

**Статистика Ферми-Дирака** - квантовая статистика, применяемая к системам тождественных фермионов (как правило, частиц с полуцелым спином, подчиняющихся принципу запрета Паули, то есть, одно и то же квантовое состояние может занимать не более одной частицы); определяет статистическое распределение фермионов по энергетическим уровням системы, находящейся в термодинамическом равновесии; предложена в 1926 Э.Ферми и одновременно П.Дираком, который выяснил ее квантово-механический смысл; позволяет найти вероятность, с которой фермион занимает данный энергетический уровень. В 1927 эта статистика применена А.Зоммерфельдом к электронам в металле.

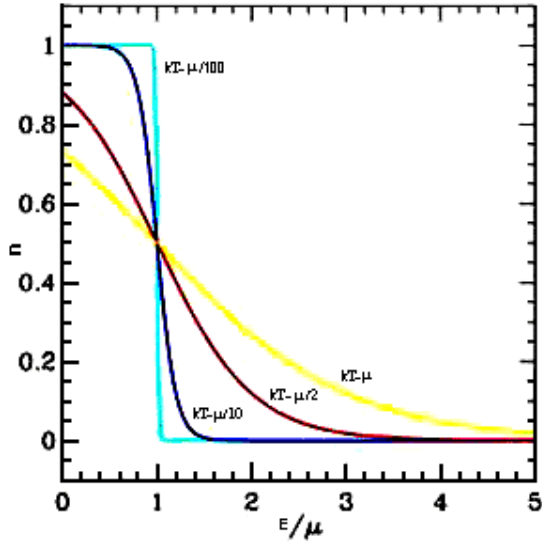
Статистики Ферми — Дирака и Бозе-Эйнштейна применяются в том случае, когда необходимо учитывать квантовые эффекты, т.е. когда частицы обладают «неразличимостью». Квантовые эффекты проявляются тогда, когда концентрация частиц  $(N/V) \geq n_q$  (где  $n_q$  - квантовая концентрация). Квантовая концентрация — это концентрация, при которой расстояние между частицами соизмеримо с длиной волны де Бройля, то есть когда волновые функции частиц соприкасаются, но не перекрываются. Квантовая концентрация зависит от температуры. Статистика Ферми — Дирака применяется к фермионам (частицы, которые подчиняются принципу запрета Паули, например, частицы со спином 1/2), статистика Бозе-Эйнштейна применяется к бозонам (например, к частицам с целым спином). Оба этих распределения становятся распределением Максвелла-Больцмана при высоких температурах и низких концентрациях.



**Рис. 22.** Распределение Ферми-Дирака как функция температуры. Заполнение уровней с энергиями  $E > \mu$  растёт с увеличением температуры

Распределением Максвелла-Больцмана описываются классические «различимые» частицы. В статистике Максвелла-Больцмана конфигурация частицы А в состоянии 1 и частицы В в состоянии 2 отличается от конфигурации частицы В в состоянии 1 и частицы А в состоянии 2. Когда эта идея была проработана полностью, оказалось, что распределение частиц

по энергетическим состояниям приводит к нефизическим результатам для энтропии, что известно, как парадокс Гиббса. Эта проблема исчезла, когда стал ясен тот факт, что все частицы неразличимы. Распределения Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна приближаются к статистике Максвелла-Больцмана в пределе высоких температур и низких плотностей. Статистика Максвелла-Больцмана хорошо описывает поведение газов. Распределение Ферми-Дирака часто используется для описания электронов в твердых телах, на ней, к примеру, базируются основные положения теории полупроводников в частности и электроники в целом.



Распределение Ферми-Дирака может быть представлено в виде:

$$f(E) = \frac{1}{A * e^{E/kT} + 1}, \quad (80)$$

где  $A$  – нормирующий множитель.

В зависимости от того, к каким частицам применяется статистика Ферми-Дирака, функция  $f(E)$  несколько изменяется.

**Рис. 23.** Распределение Ферми-Дирака как функция от  $E/\mu$ , построенная для 4 различных температур. С ростом температуры ступенька размывается

В статистике Ферми-Дирака среднее число частиц в состоянии с энергией  $E_i$  есть

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\frac{E_i - \mu}{kT}} + 1}, \quad (81)$$

где:  $n_i$  - среднее число частиц в состоянии  $i$ ,  $E_i$  - энергия состояния  $i$ ,  $g_i$  – кратность вырождения состояния  $i$  (число состояний с энергией  $E_i$ ),  $\mu$  – химический потенциал (который равен энергии Ферми  $E_F$  при абсолютном нуле температуры),  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  - абсолютная температура.

В (идеальном) ферми-газе  $\mu = E_F$ . В этом случае (полагая уровни энергии невырожденными  $g_i = 1$ ), функция распределения частиц называется функцией Ферми:

$$F(E) = \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{kT}} + 1} \quad (82)$$

где  $f_{FD}$  – число частиц на квантовое состояние,  $k$  – постоянная Больцмана,  $E_F$  - энергия Ферми. При  $T=0$  все энергетические уровни ниже  $E_F$  оккупированы ( $f_{FD}=1$ ), а все энергетические уровни выше  $E_F$  пусты ( $f_{FD}=0$ ). При росте температуры, некоторые уровни выше  $E_F$  оккупируются при расходе уровней ниже  $E_F$ .

**Энергия Ферми ( $E_F$ ) системы невзаимодействующих фермионов** - увеличение энергии основного состояния системы при добавлении одной частицы. Это эквивалентно химическому потенциалу системы в ее основном состоянии при абсолютном нуле температур.  $E_F$  можно интерпретировать как максимальную энергию фермиона в основном состоянии при абсолютном нуле температур. Энергия Ферми - одно из центральных понятий физики твёрдого тела. Физический смысл уровня Ферми: вероятность попадания частицы на уровень Ферми составляет 0,5 при любых температурах.

Для фиксированной температуры  $T$ ,  $F(E)$  есть вероятность того, что доступное состояние с энергией  $E$  будет занято фермионом.  $F(E)$  - убывающая функция  $E$ , т.е. высокоэнергетические состояния занимаются с меньшей вероятностью. Энергетический уровень  $E$  имеет вырождение  $g_E$ .

Ожидаемое число частиц, в суммарном состоянии с энергией  $E$ .

$$\bar{n} = g_E \cdot \frac{1}{e^{\frac{E - \mu}{kT}} + 1} \quad (83)$$

Для всех температур  $T$ ,  $\bar{n}(\mu) = 0,5$ . Это означает, что состояния с энергией  $\mu$  всегда будут иметь одинаковую вероятность быть заполненными или свободными. В пределе  $T \rightarrow 0$ ,  $\bar{n}$  становится ступенчатой функцией. Все состояния с энергией меньше химического потенциала  $\mu$  будут заняты с вероятностью 1. Состояния с энергией выше химического потенциала  $\mu$  будут свободны. Химический потенциал при нулевой температуре – энергия Ферми, обозначается  $E_F$ , т. е.  $E_F = \mu(T=0)$ . Химический потенциал зависит от температуры. Однако, для систем, имеющих температуру ниже температуры Ферми,  $T_F = E_F/k$ , часто используется аппроксимация  $\mu \approx E_F$ .

**Замечание.** При абсолютном нуле, вероятность состояний с энергиями меньше энергии Ферми равна нулю и для состояний с энергиями, больше чем энергия Ферми тоже равна нулю. Все уровни ниже энергии Ферми трактуются как заполненные, но никакая частица не имеет энергию больше  $E_F$ . Это полностью совместимо с принципом запрета Паули, где на каждом квантовом состоянии может находиться одна, но только одна частица.

Вероятность, что частица будет иметь энергию E

При абсолютном нуле, фермионы будут заполнять все доступные энергетические состояния ниже уровня  $E_F$  одной (и только одной) частицей. Частицы подчиняются принципу запрета Паули. При высоких температурах происходит повышение уровней выше уровня Ферми

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E - E_F)/kT} + 1}$$

Ферми-Дирак

При низких температурах энергетические состояния ниже энергии ферми имеют вероятность 1, вероятность состояний выше энергии Ферми равны нулю

Квантовая разннца, возникающая из-за того, что частицы неразличимы

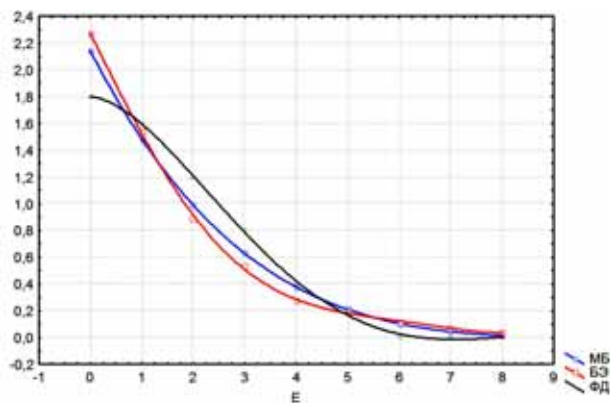
**Рис. 24.** Функция, описывающая распределение частиц по энергиям в предположении реализации статистики Ферми-Дирака.

Теперь мы можем провести сравнение всех трёх рассмотренных в данной лекции распределений (Табл. 5).

**Табл. 5.** Три типа распределения частиц по энергиям.

Максвелла-Больцмана (классическое)	Бозе-Эйнштейна (квантовое)	Ферми-Дирака (квантовое)
$f(E) = \frac{1}{A * e^{-E/kT}}$	$f(E) = \frac{1}{A * e^{E/kT} - 1}$	$f(E) = \frac{1}{A * e^{E/kT} + 1}$
Идентичные, но различимые частицы	Идентичные неразличимые частицы с целым спином (бозоны)	Идентичные неразличимые частицы с полуцелым спином (фермионы)

Для более наглядного представления график соответствующих статистик, на Рис. проведено решение задачи распределения шести идентичных частиц по девяти энергетическим состояниям.



**Рис. 25.** Сравнение распределений Максвелла-Больцмана, Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака.