



ЭУМК по физике

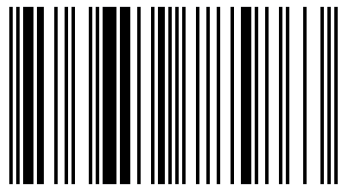
Целью данной работы было создание электронного учебно-методического комплекса (ЭУМК) по дисциплине «Физика» для технических университетов инженерно-технических и информационных специальностей. Новым качеством разработанного учебника является изложение современного курса физики в рамках новых образовательных технологий, использующих возможности современной компьютерной техники. Преподавателям, интересующимся историей физики, будет полезно узнать драматическую историю введения в 1900 году М. Планком кванта энергии («...это был акт отчаяния» – как писал впоследствии сам М. Планк). В данном электронном учебнике на конкретном примере показана драма идей XX века и как «... она (физика) идет к единственно верному методу и единственно верной философии естествознания не прямо, а зигзагами, не видя своей «конечной цели», а приближаясь к ней ощупью, шатаясь, а иногда даже задом». Творчество М. Планка – это ярчайший пример диалектического процесса познания мира человеком.

Аксенов Валерий Васильевич - доцент кафедры физики, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, г. Минск, Республика Беларусь.

Валерий Васильевич Аксенов  
Николай Трофимович Квасов

# Электронный учебно-методический комплекс по физике

Лекции по квантовой механике и статистической физике



978-3-659-78586-3

Аксенов, Квасов

 **LAMBERT**  
Academic Publishing

Валерий Васильевич Аксенов  
Николай Трофимович Квасов

Электронный учебно-методический комплекс по физике

Библиотека БГУИР

Библиотека БГУИР

**Валерий Васильевич Аксенов  
Николай Трофимович Квасов**

**Электронный учебно-методический  
комплекс по физике**

**Лекции по квантовой механике и  
статистической физике**

**LAP LAMBERT Academic Publishing**



## **Impressum / Выходные данные**

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek: Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Alle in diesem Buch genannten Marken und Produktnamen unterliegen warenzeichen-, marken- oder patentrechtlichem Schutz bzw. sind Warenzeichen oder eingetragene Warenzeichen der jeweiligen Inhaber. Die Wiedergabe von Marken, Produktnamen, Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen u.s.w. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutzgesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Библиографическая информация, изданная Немецкой Национальной Библиотекой. Немецкая Национальная Библиотека включает данную публикацию в Немецкий Книжный Каталог; с подробными библиографическими данными можно ознакомиться в Интернете по адресу <http://dnb.d-nb.de>.

Любые названия марок и брендов, упомянутые в этой книге, принадлежат торговой марке, бренду или запатентованы и являются брендами соответствующих правообладателей. Использование названий брендов, названий товаров, торговых марок, описаний товаров, общих имён, и т.д. даже без точного упоминания в этой работе не является основанием того, что данные названия можно считать незарегистрированными под каким-либо брендом и не защищены законом о брендах и их можно использовать всем без ограничений.

Coverbild / Изображение на обложке предоставлено: [www.ingimage.com](http://www.ingimage.com)

Verlag / Издатель:

LAP LAMBERT Academic Publishing

ist ein Imprint der / является торговой маркой

OmniScriptum GmbH & Co. KG

Heinrich-Böcking-Str. 6-8, 66121 Saarbrücken, Deutschland / Германия

Email / электронная почта: [info@lap-publishing.com](mailto:info@lap-publishing.com)

Herstellung: siehe letzte Seite /

Напечатано: см. последнюю страницу

**ISBN: 978-3-659-78586-3**

Copyright / АВТОРСКОЕ ПРАВО © 2015 OmniScriptum GmbH & Co. KG

Alle Rechte vorbehalten. / Все права защищены. Saarbrücken 2015

## Оглавление

|   |     |
|---|-----|
| ВВЕДЕНИЕ В СТРУКТУРУ И СОДЕРЖАНИЕ КОМПЛЕКСА .....                                       | 3   |
| ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ФИЗИКУ .....   | 29  |
| 1. Предпосылки создания новой теории микромира .....                                    | 32  |
| 2. Уравнение Шредингера .....   | 57  |
| 3. Математические основания квантовой механики .....                                    | 68  |
| 3.1. Многомерные линейные пространства операторов .....                                 | 71  |
| 3.2. Линейные самосопряженные операторы .....   | 73  |
| 4. Физико-математический формализм квантовой механики.....                              | 81  |
| 4.1. Операторы квантовой механики .....   | 84  |
| 5. Описание квантово-механических систем с помощью .....                                | 90  |
| 5.1. Свободное движение частицы.....  | 90  |
| 5.2. Движение частицы через потенциальный барьер .....                                  | 92  |
| 5.3. Движение атомных частиц внутри потенциального ящика.....                           | 95  |
| 5.4. Движение одномерного гармонического осциллятора .....                              | 97  |
| 5.5. Атом водорода.....   | 99  |
| 6. Собственный механический и магнитный момент электрона.....                           | 106 |
| 6.1. Уравнение Паули .....  | 109 |
| 7. Системы из одинаковых частиц .....   | 110 |
| 8. Атом гелия .....   | 114 |
| СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА.....  | 119 |
| 1. Основные идеи теории .....   | 119 |
| 2. Функции распределения в статистической физике .....                                  | 129 |
| 2.1. Микроканоническое распределение.....   | 129 |
| 2.3. Большое каноническое распределение .....   | 132 |
| 2.4. Статистические распределения Ферми и Бозе .....                                    | 134 |
| 2.5. Распределение Максвелла–Больцмана.....   | 137 |
| 3. Использование функций распределения для оценки физических характеристик систем ..... | 139 |

|   |     |
|---|-----|
| 3.1. Средние значения некоторых характеристик движения молекул в идеальном газе ..... | 139 |
| 3.2. Вычисление свободной энергии идеального газа .....                               | 141 |
| 3.3. Средняя энергия квантового осциллятора .....                                     | 143 |
| 3.4. Уравнение состояния для Ферми и Бозе газов .....                                 | 145 |
| 3.5. Теплоемкость твердого тела .....   | 149 |
| 4. Фазовые переходы .....   | 153 |
| 4.1. Теория среднего поля .....   | 155 |
| 4.2. Теория Ландау .....  | 158 |
| 4.3. Основные идеи современной теории критических явлений                             | 168 |
| КОММЕНТАРИЙ К КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОМУ ОПИСАНИЮ ДВИЖЕНИЯ В МИКРОМИРЕ .....              | 178 |
| Кратко о физическом вакууме .....   | 182 |
| Квантово-механическое описание объектов микромира .....                               | 188 |
| Реальность виртуальных состояний .....  | 197 |
| ЛИТЕРАТУРА .....  | 202 |

## **Введение в структуру и содержание комплекса**

В современных условиях успешность жизнедеятельности выпускников высшей школы в значительной степени зависит от уровня развития таких качеств личности, как способность к адаптации к бурным изменениям окружающей жизни, внутренняя потребность и готовность к самореализации в будущей деятельности. Это обуславливает перенос акцентов в целях современного образования: на первый план выдвигается не столько формирование знаний, умений и навыков самих по себе, сколько развитие личности, способной к саморазвитию, саморегуляции, самоопределению и самореализации в настоящем и будущем. Достижение выше обозначенной иерархии целей на основе активизации только внешней составляющей деятельности без обращения к личностным (внутренним) механизмам ее осуществления становится невозможным, поскольку при таком подходе востребованной остается лишь отражательная способность познающего сознания, а не его смыслопорождающие функции. Поэтому одной из главных задач обучения становится поиск и создание дидактических условий, стимулирующих внутренние силы личности в организации своей учебной деятельности, активизирующих процессы самоорганизации. Успешному решению этой задачи, по нашему мнению, в значительной степени будет способствовать созданный электронный учебно-методический комплекс (ЭУМК) по дисциплине «Физика».

Актуальность разработки ЭУМК по физике обусловлена, в первую очередь, необходимостью получения студентами самых

современных представлений в физике и ее последних достижений с возможностью оперативной корректировки материала. Очевиден также положительный эффект в учебном процессе за счет изложения физики в рамках новых образовательных технологий, использующих огромные возможности современной компьютерной техники. Кроме того, здесь эффективно решается проблема нехватки учебного материала в данной области. Наличие электронного учебника естественно, резко повысит качество образования по безотрывным формам обучения.

Целью данной работы было создание электронного учебно-методического комплекса (ЭУМК) по дисциплине «Физика» для технических университетов инженерно-технических и информационных специальностей.

В качестве основного хранилища данных было решено использовать формат PDF. Формат PDF позволяет внедрять векторные и растровые изображения, формы и мультимедиа-вставки, необходимые шрифты, позволяет хранить большое количество разнообразной информации в одном файле, имеет несколько алгоритмов сжатия растровой информации. Для просмотра можно использовать официальную бесплатную программу Adobe Reader, а также программы сторонних разработчиков (однако обязательным условием является наличие plug-in'a для вашего веб-браузера при загрузке виртуальных лабораторных работ в информационном блоке на странице).

Страница каждой части комплекса содержит шапку (header) с графическим заголовком комплекса и соответствующей главы, меню, расположенное слева и информационный блок. Под информационным

блоком мы подразумеваем то поле на экране, которое отведено для показа текущего документа.

Комплекс не имеет статичных размеров, и весьма гибко растягивается под любые разрешения экрана. Минимальной шириной является величина порядка 600 пикселей, минимальная высота ограничена текущей высотой меню, шапки и футера. Информационный блок занимает все доступное место, как показано на рис. 1.

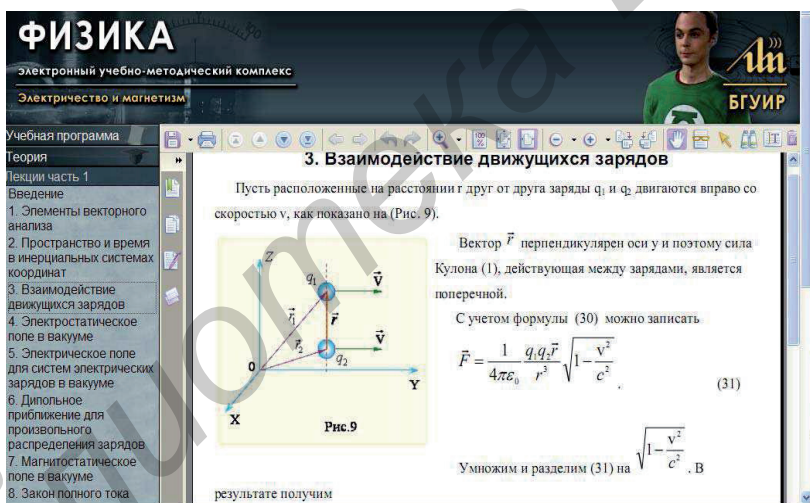


Рис. 1. Скриншот страницы ЭУМК с информационным блоком

Меню комплекса плавно разворачивается без перезагрузки страницы, а также имеет двойную вложенность. Такая гибкость визуального отображения была достигнута разработкой собственного

меню и скрипта обработки событий на языке javascript. Интерфейсы всех частей комплексов были представлены в темных тонах, что позволило им не представлять собой отвлекающий фактор при работе студентов с комплексом.

В данном электронном учебно-методическом комплексе по дисциплине «Физика» представлены следующие разделы: механика, теория относительности, термодинамика и молекулярная физика, электромагнетизм, оптика, квантовая и статистическая физика, физика элементарных частиц, физика атомного ядра, физика молекул и физика твердого тела.

Особое внимание в ЭУМК уделено современной трактовке ряда фундаментальных положений специальной теории относительности, квантовой физики, физики элементарных частиц, природе строения материи.

В представляемом электронном учебно-методическом комплексе содержится теоретическое описание и методика проведения всех лабораторных работ по курсу общей физики, имеющихся в лабораториях Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники (БГУИР). Разработаны современные мультимедийные средства иллюстрации различных физических процессов и явлений, а также оригинальная система тестирования и самоконтроля.

Новым качеством разработанного учебника является изложение современного курса физики в рамках новых образовательных технологий, использующих возможности современной компьютерной техники.

Электронный учебно-методический комплекс по физике выполнен в виде веб-страниц и состоит из 4-х блоков-разделов курса физики, а также блоков «Помощь» и «Авторы» (рис. 2).

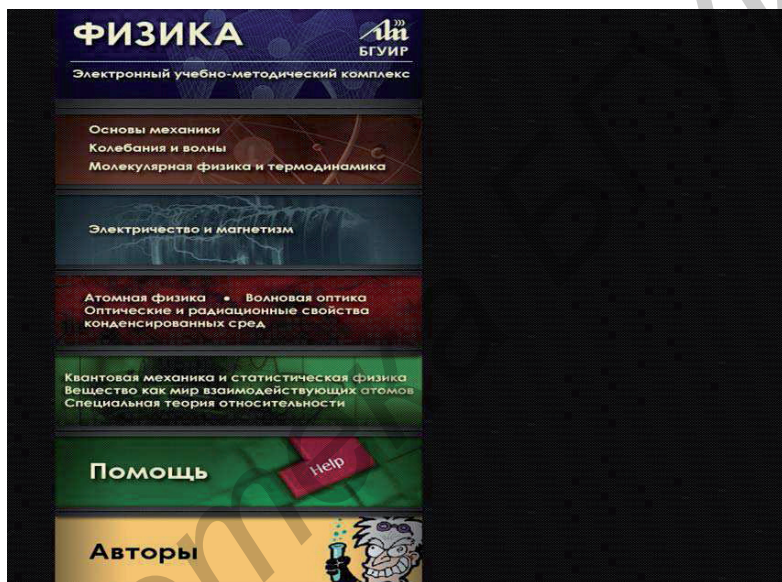


Рис. 2. Скриншот главной страницы ЭУМК по дисциплине «Физика»

Каждый блок, посвященный конкретному разделу курса физики, имеет следующую структуру (рис. 3):





Рис. 3. Скриншот страницы раздела «Основы механики. Колебания и волны. Молекулярная физика и термодинамика»

- Учебная программа.
- Теория.
- Практика.
- Самоконтроль.
- Медиаприложения.
- Справка.
- Сайт БГУИР

Теоретическая часть разработанного электронного учебно-методического комплекса по дисциплине «Физика» для нового поколения образовательных стандартов направления инженерно-

технических и информационных специальностей состоит из следующих блоков:

Курс общей физики, который включает в себя:

- Основы механики. Колебания и волны. Молекулярная физика и термодинамика.
- Электромагнетизм.
- Волновая оптика.
- Атомная и ядерная физика.

Избранные главы физики:

- Квантовая механика и статистическая физика.
- Вещество как мир взаимодействующих атомов.
- Введение в специальную теорию относительности.
- Физика в задачах и решениях.

Организация курса общей физики классическая. Основные физические идеи рассмотрены довольно подробно. Все части курса общей физики написаны с учетом типовой учебной программы для подготовки инженеров по информационным и инженерно-техническим специальностям.

При написании раздела «**Электромагнетизм**» авторы использовали несколько не традиционный подход. Электрические и магнитные поля движущихся зарядов рассматриваются как проявления теории относительности и инвариантности электрического заряда. Подобный подход фокусирует внимание на таких фундаментальных вопросах как сохранение заряда, его инвариантность и физический смысл поля. Единственным формальным аппаратом специальной теории относительности, который при этом действительно необходим, является лоренцевское

преобразование координат и формула сложения скоростей. При написании раздела «**Электromагнетизм**» авторы использовали несколько не традиционный подход. Электрические и магнитные поля движущихся зарядов рассматриваются как проявления теории относительности и инвариантности электрического заряда. Подобный подход фокусирует внимание на таких фундаментальных вопросах как сохранение заряда, его инвариантность и физический смысл поля. Единственным формальным аппаратом специальной теории относительности, который при этом действительно необходим, является лоренцевское преобразование координат и формула сложения скоростей.

**Квантовая механика и статистическая физика.** Как показывает многолетняя практика, при изложении основ квантовой механики наибольшее непонимание у студентов вызывает волновой метод описания движения частиц в микромире. «Частица-волна» – что это? Не прибегая к идее наличия волновых свойств у отдельной частицы (а эта уже далеко не современная идея в течение многих лет молчаливо переписывается из учебника в учебник), в данном электронном комплексе показана возможность действительно волнового описания движения микрочастиц, если за основу взять лишь факт квантования действия движущейся частицы в единицах постоянной Планка. При этом для определенных условий легко получается уравнение Шредингера, которое даже в современной литературе таинственно проходит мимо понимания читателя и особенно, студента.

Преподавателям, интересующимся историей физики, будет полезно узнать драматическую историю введения в 1900 году М. Планком кванта энергии («...это был акт отчаяния» – как писал

впоследствии сам М. Планк). Пытаясь «состыковать» твердое тело, имеющее хоть и большое, но конечное число степеней свободы, и электромагнитное поле, им (телом) излучаемое, с бесконечным по определению числом степеней свободы, Планк «изобретает» электромагнитные резонаторы, совокупностью которых, представляется вся энергия излучения внутри замкнутого объема. В последующей учебной и научной литературе резонатор становится осциллятором, приобретая материальные очертания колеблющегося электрона в атоме. Однако здесь появляются вопросы. Действительно, Планк впоследствии рассматривал и электрический осциллятор Герца, квантуя его энергию. Как он впервые показал, а впоследствии было получено при решении уравнения Шредингера, средняя энергия материального осциллятора кроме дискретной части энергии содержит еще дополнительное слагаемое, так называемую «нулевую энергию или энергию основного состояния. Если теперь использовать эту энергию при получении выражения для спектральной плотности энергии излучения абсолютно черного тела, то известного закона излучения Планка не получится.

В данном электронном учебнике на конкретном примере показана драма идей XX века и как «... она (физика) идет к единственно верному методу и единственно верной философии естествознания не прямо, а зигзагами, не видя своей «конечной цели», а приближаясь к ней ощупью, шатаясь, а иногда даже задом». Творчество М. Планка – это ярчайший пример диалектического процесса познания мира человеком. Так у самого Планка материальный осциллятор приобретает «нематериальные» свойства излучения: «При этом получился замечательный результат, что это отношение совершенно не зависит от природы резонатора, даже от его

постоянной затухания – обстоятельство особо благоприятное и радостное для меня, так как благодаря ему всю проблему можно упростить, заменяя энергию излучения энергией резонатора, отчего запутанная система со многими степенями свободы заменилась простой системой с одной единственной степенью свободы». Из этого следует, что осциллятор вводится как вспомогательный модельный элемент для описания свойств электромагнитного поля. «Таким образом, законы теплового излучения сведены к нахождению вероятности определенного значения лучистой энергии ...». А это есть главная идея в теории М. Планка.

Впервые в учебной литературе по физике в данном учебнике студентам технических университетов излагаются современные представления о сущности квантов электромагнитного излучения – фотонов, как их назвал в 1926 году Льюис.

Созданная впоследствии квантовая теория поля использовала «внешнюю» сторону этой идеи. Действительно, разложение электромагнитного поля по собственным типам колебаний или модам приводит к тому, что его энергия может быть представлена как сумма энергий отдельных мод. Переходя от фурье-образов вектора-потенциала  $\vec{A}$  (амплитуды в фурье-разложении) к обобщенным координатам и импульсам получают поле, как совокупность гармонических осцилляторов. Если теперь по известной процедуре обобщенные координаты и импульсы заменить соответствующими операторами, то оператор Гамильтона электромагнитного поля может быть записан как сумма гамильтонианов квантовых осцилляторов. Дальнейшее введение операторов рождения  $\hat{a}^*$  и уничтожения  $\hat{a}$  фотонов приводит в итоге к конечной формуле квантовой теории поля

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) h\nu,$$

где  $E_n$  – полная энергия гармонического осциллятора,

$$n = 0; 1; 2; \dots,$$

$h$  – постоянная Планка,

$\nu$  – частота.

Эта формула в точности соответствует выражению для собственных значений оператора Гамильтона квантового одномерного гармонического осциллятора:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x),$$

где  $\psi(x)$  – волновая функция,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 - \text{оператор Гамильтона,}$$

$\hat{p}_x$  – проекция оператора импульса,

$m$  – масса осциллятора,

$$\omega = 2\pi\nu - \text{циклическая частота.}$$

Как очевидно из вышеприведенных рассуждений у квантовой теории поля нет физического наполнения, свидетельствующего о наличии структуры самого поля. Энергия и импульс, передаваемые при взаимодействии поля с веществом, четко присутствуют в волновой теории Максвелла и наличие этих характеристик у фотона, представляющего в определенном выше смысле моду излучения, не является новым качеством.

Внимание студентов особенно обращается на то, что структуру любого материального объекта, будь это поле или вещество можно установить, лишь введя соответствующую систему координат. И для квантов электромагнитного поля – фотонов здесь возникает проблема. Напомним сначала, что масса покоя фотона равна нулю. Очевидно,

что это обстоятельство не позволяет сформировать из таких объектов многообразия, на котором можно установить метрическую протяженность (переход от одной структурной единицы многообразия к другой). Установление же метрической протяженности (а, следовательно, и структурных особенностей рассматриваемого объекта) требует в свою очередь, как указывалось выше, введения системы координат, которая по вполне понятным причинам не может быть связана с фотонами, движущимися со скоростью света. Следовательно, такие объекты как фотоны в принципе существовать не могут (на основании чего можно установить факт их локализации в пространстве?).

С другой стороны хорошо подтвержденным экспериментальным фактом является квантование взаимодействия поля и вещества (именно взаимодействия, так как фундаментальная постоянная Планка  $h$  является квантом действия). Вещество, в силу специфики связанного состояния составляющих его элементов, поглощает и излучает поле порциями, каждая из которых имеет энергию  $h\nu$  и импульс  $\frac{h\nu}{c}$ . И здесь будет весьма к месту упомянуть образное сомнение М. Планка о существовании неделимых порций энергии электромагнитного поля: если пиво из бочки черпать кружками объемом, например, 0,5 литра, то это не значит, что пиво в бочке существует в виде совокупности таких порций по 0,5 литра.

Таким образом, студенты должны знать, что, ввиду специфической природы электромагнитного излучения существование пространственного выделенных сгустков поля – фотонов принципиально невозможно. Такой структуры как у вещества, у поля быть не может. Тем не менее, возбужденное

состояние квантового вакуума, создаваемое, например, ускоренно движущимся зарядом, с помощью определенной процедуры можно представить в виде некоторых квазичастиц – фотонов и «работать» с ними при описании процессов взаимодействия со структурными составляющими вещества (как, например, не вызывает сомнений весьма полезная процедура введения фононов при рассмотрении ряда физических процессов в твердом теле).

Затруднения с пониманием основ квантовой механики еще более усугубляются переписываемым десятилетиями из книги в книгу утверждением о том, что волновая функция, являющаяся решением уравнения Шредингера, сама по себе физического смысла не имеет, а через квадрат своего модуля определяет только плотность вероятности обнаружить частицу в данной точке пространства. В настоящем электронном учебнике этому вопросу уделено большое внимание: детально прослеживается закономерный процесс «рождения» волновой функции, как математического способа описания движения в микромире [1]. Здесь впервые для студентов технических университетов излагаются современные представления о роли процесса измерения при отображении реальной действительности микромира. В данной работе показывается, что описание на основе понятия относительности к средствам наблюдения дает более глубокую и тонкую объективную характеристику микробъекта, чем это было возможно на основе идеализаций классической физики. Исходя из этого студентам-«технарям» (у которых курс общей физики не превышает 3-х семестров), даются основы физико-математического формализма квантовой механики – самого сложного для понимания вопроса. Речь идет о теории



линейных операторов, их собственных функциях и собственных значениях.

Приняв за источник наших суждений о свойствах объекта акт его взаимодействия с прибором, и положив в основу описания явлений относительность к средствам наблюдения, мы показываем, что при этом с необходимостью вводится понятие вероятности, а тем самым и понятие потенциальной возможности. При этом показывается качественное отличие этой вероятности как существенного элемента объективного описания объекта от вероятности классической, отражающей неполноту наших знаний о нем. При определенных внешних условиях результат взаимодействия объекта с прибором не является, вообще говоря, предопределенным однозначно, а обладает лишь некоторой вероятностью. Серия таких взаимодействий приводит к статистике, соответствующей определенному распределению вероятностей. Со своей стороны распределение вероятностей отражает объективно существующие при данных условиях потенциальные возможности. А такая задача, как известно, решается на основе теории линейных операторов, их собственных функций и собственных значений. Это центральный вопрос квантовой механики и без его глубокого понимания студентами дальнейшее изложение этого предмета бессмысленно. Студент должен совершенно четко представлять, что понятие собственной функции оператора приводит к более общему понятию волновой функции, описывающей свойства физической системе, при данных условиях, потенциальные возможности. Волновая функция, следующая из уравнения Шредингера, непосредственно связана с оператором полной энергии системы, и это определяет ее статус среди собственных функций других операторов. Таким

образом, студентам излагаются принципы, лежащие в основе новых понятий и категорий физики микромира. В частности, вводится положение о придании объективного характера потенциальным возможностям взаимодействия атомных частиц с окружающим миром и измерительным прибором. Кроме того, показано, что специфика микромира такова, что нельзя в принципе провести грань между тем, что мы называем частицей и окружающим миром, с которым она взаимодействует. Волновая функция в этом случае отражает не статистическую сущность набора состояний, а вероятностный процесс, имеющий место при взаимодействии частицы с прибором, когда каждое взаимодействие изменяет ее физическое состояние. Потенциальные возможности возникают и исчезают в процессе этого взаимодействия.

На основании рассмотренного материала студентам предлагается новый взгляд на физику микромира: проблему движения в описательном смысле нельзя решить, прибегая к традиционным понятиям волны или частицы, что делается в большинстве учебников. Это настолько рафинированные из окружающего нас микромира категории, что их непосредственное использование приводит к парадоксам и недоразумениям. Студент, изучая основы квантовой теории, должен знать основные гносеологические позиции, на которых стоит эта наука. В данном электронном учебнике четко показано, что любая микрочастица не может быть физически выделена из окружающего ее и взаимодействующего с ней мира. Поэтому представление об абсолютно отдельной частице на уровне взаимодействия, является результатом идеализации, которая связана с нашим традиционным образом мышления. Наши («макроскопические») представления принципиально неприменимы

там, где взаимодействие «размазывает» частицу и понятие массы, заряда и других характеристик начинают носить фиктивный характер.

Невозможность разложить реальность на индивидуальные элементы предполагает в понятие «реальность» включить потенциально возможное, то есть определенным образом связанную совокупность виртуальных состояний, которые при наложении определенного силового поля или иных энергетических воздействий могут оказаться осуществившимися. Таким образом, студент, изучающий основы квантовой механики, для глубокого усвоения ее основных принципов, должен знать, что истинная реальность есть реальность, дополненная миром виртуальных состояний, весь возможный набор которых представлен суперпозицией частных состояний волновой функции. Причем между этими виртуальными состояниями существует полная корреляция, представленная нормировкой волновой функции. Любое воздействие, связанное с переносом хотя бы одного кванта действия, приводит к скачкообразному переходу из вакуума виртуальных состояний (который описывается волновой функцией) в состояние с определенным значением измеряемой величины. И в тот же момент вся совокупность виртуальных состояний одновременно исчезает.

Теперь движение в микромире можно представить как периодический процесс перехода из виртуального состояния в реальное и наоборот. Это не движение по неделимым ячейкам пространства, а постоянный процесс взаимодействия частицы с коррелированной в пространстве совокупностью ее виртуальных состояний. Модельно такое явление можно представить в виде некоторого волнового процесса. Очевидно, что переход из виртуального состояния (это потенциально возможное состояние) в

реальное не может происходить непрерывно, а носит скачкообразный характер. Образно говоря, не может быть чего-то немножко реального или немножко потенциального. В рамках такого подхода находят хорошее физическое объяснение дифракция, интерференция, когерентность движущихся частиц и разрешаются все известные парадоксы квантовой теории.

Доступное изложение этого материала в данном учебнике дает возможность студентам понять идейную сторону квантовой механики и, как следствие, воспринимать ее как глубокую теорию микромира, а не как совокупность не связанных друг с другом формул без внутреннего физического наполнения.

Описание фазовых переходов представляет собой одну из важнейших проблем физики, ибо это одно из самых распространенных явлений на всех масштабных уровнях движения материи. В учебной литературе по курсу общей физики излагаются, как правило, достижения в этой области в лучшем случае первой половины XX века, что для выпускников технических университетов сегодня явно недостаточно.

В настоящем электронном учебнике в доступной форме изложены основные положения современной теории фазовых переходов, для понимания которых достаточно знать элементарные правила дифференцирования, интегрирования и основы векторной алгебры [1]. Подробно рассмотрены четыре термодинамических потенциала: внутренняя энергия, свободная энергия, термодинамический потенциал Гиббса и энтальпия, которые представляют собой энергию системы, выраженную через одну интенсивную и одну экстенсивную термодинамические переменные. Авторами разработана оригинальная диаграмма, позволяющая

определить выражение для каждого из потенциалов и установить связь между ними. Такая разработка значительно облегчает усвоение основного блока знаний по термодинамике и статистической физике, ибо через термодинамические потенциалы и их производные определяются средние значения макроскопических характеристик системы. Студентам детально разъясняется, что сами термодинамические потенциалы определяются из модельных микроскопических представлений статистической физики.

На классическом примере ферромагнетика показана «работа» теории среднего поля, где в рамках совершенно простых и физически ясных предположений оказывается возможным определить температуру фазового перехода через постоянные величины, характеризующие средний магнитный момент и локальное магнитное поле на нем.

Впервые в учебной литературе по общей физике в данном электронном учебнике излагаются основные положения теории Ландау и фундаментальное значение введенного им параметра порядка, описывающего фазовый переход вблизи критической точки. Введение в рассмотрение параметра порядка позволило построить новую классификацию фазовых переходов и свести их описание к кинетическому уравнению, играющему в своей области такую же роль, как уравнение Шредингера в микромире. Значительное место уделено основным идеям современной теории критических явлений – методу ренормализационной группы. Студентам предлагается идейный каркас этой теории и на конкретном примере поведения корреляционной функции при фазовом переходе показывается «работа» этого метода.

**Вещество как мир взаимодействующих атомов.** Типовая программа по курсу общей физики предусматривает изучение принципов действия основных активных элементов интегральных микросхем: диодов и транзисторов. Так как современная цивилизация базируется на полупроводниковой электронике, то это уже не столько специальный вопрос общей физики, сколько вопрос общей культуры. Изложение физических основ работы диодов, транзисторов и других приборов, в основе действия которых лежат контактные явления, с необходимостью требует глубокого знания зонной теории твердых тел. Как показывает анализ эта тема в учебной литературе изложена крайне недостаточно. Те общие положения, которые качественно («на пальцах») иллюстрируют явление расщепления энергетических уровней атомов при формировании конденсированного состояния, совершенно недостаточны для качественного изложения физических основ даже простейших элементов полупроводниковой электроники. Крайне малое количество часов, выделяемое на изучение физики, еще более усугубляет эту проблему. В настоящем электронном учебно-методическом комплексе дается простое и вместе с тем строгое изложение основ теории формирования зон в кристаллах [1]. Для понимания этого материала студенту достаточно знать решение задачи квантовой механики о движении свободной частицы в вакууме (эта задача всегда решается на практических занятиях).

Полагая в качестве нулевого приближения свободную частицу и рассматривая периодическое поле как возмущение, рассчитываются первая, вторая и т. д. поправки к энергии основного состояния. Строго показана физическая причина разрывов энергии на ее зависимостях от волнового вектора для состояний, лежащих на границах зон Бриллюэна. В этих состояниях, вследствие Вульф-брэгговского

отражения, падающая и отраженная волны интерферируют и в направлениях, перпендикулярных атомным плоскостям, возникают стоячие волны, которые, как известно, энергию не переносят. В стоячей волне энергия дважды за период пульсирует между узлом и пучностью. Разрыв в энергии приводит к разрыву в спектре, в результате чего возникают запрещенные значения энергии. Эти энергетические области называются запрещенными зонами. Таким образом, студент получает концентрированную информацию о физической причине образования зонной структуры энергетического спектра: Вульф-брэгговской интерференции электронных волн. Причем ширина запрещенной зоны увеличивается с ростом потенциального поля и уменьшается с ростом полной энергии. Сама же полная энергия является квадратичной функцией волнового вектора в окрестности экстремальных точек [1].

**Введение в специальную теорию относительности.** Введение в специальную теорию относительности (СТО), представленное в учебно-методическом комплексе, оформлено в виде пяти лекций, порядок изложения материала в которых наряду с методом получения основных уравнений и формул значительно отличается от традиционно используемого при изложении СТО в учебной литературе курса общей физики [2]. Прежде всего, это относится к последовательному использованию векторной символики для представления как уравнений, выражающих физические законы, так и преобразований, описывающих переход из одной системы отсчета в другую. В конце каждой лекции приведены вопросы и задачи, предназначенные как для самоконтроля, так и для более глубокого усвоения изучаемого материала [2].

**Физика в задачах и решениях.** Опыт работы со студентами дистанционной формы обучения показывает, что наряду с традиционными учебниками и задачками по физике студенты нуждаются в пособиях, способствующих активному освоению теоретического курса физики. На наш взгляд, для этого в наибольшей степени подходит учебное пособие, написанное в форме последовательности задач с подробными решениями, помогающими не только усваивать основные понятия и законы физики, но и осваивать язык высшей математики как адекватного средства их выражения, а также как средства постановки и решения физических проблем. Кроме того, обдумывание физического содержания задач и освоение предложенных методов их решения наряду с развитием творческой и критической активности мышления способствуют более глубокому пониманию возможностей и пределов теоретического описания явлений.

**Практическая часть** электронного учебно-методического комплекса состоит из следующих блоков:

- Лабораторный практикум.
- Методические указания для студентов дистанционного обучения.
- Виртуальный лабораторный практикум.
- Медиаприложения.

Блок лабораторного практикума по физике делится на следующие разделы:

- Механика. Колебания и волны.
- Электричество и магнетизм.
- Волновая оптика.



- Элементы квантовой теории.

В этом блоке представлены лабораторные работы, выполняемые студентами на кафедре физики БГУИР.

Блок «**Методические указания для студентов ФЗиДО** (факультет заочного и дистанционного обучения)» состоит из 3-х частей:

- Часть 1 «Механика, молекулярная физика и электродинамика».
- Часть 2 «Электромагнетизм».
- Часть 3 «Оптика, атомная и квантовая физика».

В данном блоке приводятся общие методические указания к самостоятельной работе студентов с учебными пособиями, оформлению и выполнению контрольных работ, а также примеры решения задач.

Блок «**Виртуальный лабораторный практикум**» состоит из 2-х разделов:

- Механика.
- Атомная и ядерная физика.

Виртуальный лабораторный практикум может быть использован в качестве составной части при дистанционном образовании. Пакет программ может быть полезен лицам, лишенным по тем или иным причинам возможности передвижения. Комплектом программ предусмотрено проведение компьютерных экспериментов и выполнение системы заданий. Компьютерный эксперимент позволяет: визуализировать развитие физического процесса во времени, управлять им, имитируя основные действия экспериментатора, получить численные данные и, обработав их так же, как это делает экспериментатор с данными реального эксперимента, получить

физический результат. Причем на компьютере реализованы такие эксперименты, постановка которых затруднена или вообще невозможна в учебной лаборатории. Например, в лабораторной работе «Рассеяние частиц и строение атома» моделируется опыт Резерфорда с выбором одной из моделей по результатам эксперимента. Заключение о характере движения электрона в атоме водорода делается на основе опыта по рассеянию электронов.

В блоке **«Медиаприложения»** расположены демонстрационные материалы по курсу физики в виде лекционных видеоматериалов и презентаций, а также учебных видеофильмов. Целью этих материалов является более наглядное представление отдельных материалов курса, что облегчает усвоение знаний и делает процесс обучения более увлекательным. Доступ к данным демонстрациям доступен как напрямую из рубрики «Медиаприложения», так и из текста по соответствующим ссылкам. В блоке размещены демонстрации и презентации по волновой оптике, атомным явлениям, учебные видеофильмы по электромагнетизму, а также демонстрация работы гироскопа (рис. 4).

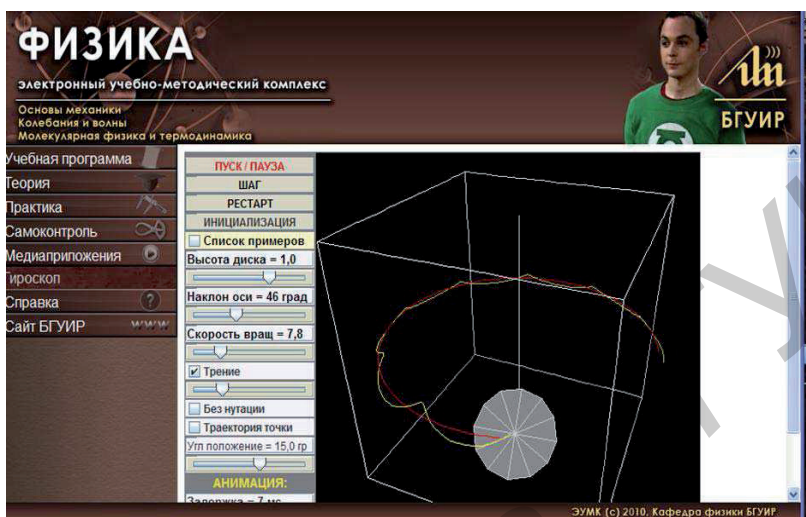


Рис. 4. Скриншот страницы ЭУМК с демонстрацией работы гироскопа

**Самоконтроль.** Комплекс тестирования состоит из двух условно независимых частей: программы тестирования знаний и программы создания тестов.

Программа тестирования позволяет определить уровень знаний студента в той или иной части курса общей физики. После прохождения теста студенту выставляется оценка, вся информация о прохождении теста записывается в журнал, доступный для просмотра.

Программа создания тестов служит для подготовки новых тестов. С ее помощью можно создать тест, включить в него критерии оценки, установить временные рамки, установить все параметры тестирования.

Материал тестирования охватывает весь курс общей физики и состоит из теоретических вопросов и задач. По каждой теме предлагается, как правило, пять вопросов и десять задач. В тестах могут встречаться вопросы следующих типов:

- 1) одиночный выбор – пользователь может выбрать только один вариант правильного ответа,
- 2) множественный выбор – пользователь выбирает один или несколько вариантов правильного ответа,
- 3) ввод ответа с клавиатуры – тестируемый вводит ответ с клавиатуры.

Все разработанные блоки ЭУМК имеют возможность внесения в содержащуюся в них информацию любых изменений, что позволяет по мере необходимости обновлять и совершенствовать ЭУМК, быстро адаптировать его для использования в других технических ВУЗах.

В качестве иллюстрации комплекса предлагаем далее ознакомиться с разделом « Квантовая механика и статистическая физика»

Библиотека БГУИР

## ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ФИЗИКУ

*«Если в результате какой-то мировой катастрофы все накопленные научные знания оказались бы уничтоженными и к грядущим поколениям живых существ перешла бы только одна фраза, то какое утверждение, составленное из наименьшего количества слов, принесло бы наибольшую информацию? Я считаю, что это атомная гипотеза (можно назвать ее не гипотезой, а фактом, но это ничего не меняет): **Все тела состоят из атомов – маленьких телец, которые находятся в непрерывном движении и притягиваются на небольших расстояниях, но отталкиваются, если одно из них плотнее прижать к другому.***

*В одной этой фразе, как вы убедитесь, содержится невероятное количество информации о мире, стоит лишь приложить к ней немного воображения и чуть соображения»*

(Р. Фейнман)

Данный курс лекций – иллюстрация того, как «немного воображения и чуть соображения» ученых привели к созданию теории твердого тела, базирующейся на законах взаимодействия движущихся атомов, и как взаимодействующие атомы с их специфическими характеристиками образуют физические свойства конденсированного состояния. Этот материал рекомендуется студентам технических университетов, и в первую очередь студентам БГУИР, где физика является базовой дисциплиной.

Первоочередной задачей было представить наиболее значимые лекции по нерелятивистской квантовой механике и статистической физике. Здесь всегда возникают трудности, так как весьма непросто изложить основы этих областей физики в течение одного семестра, когда надо остановиться не только на формальной схеме теории, но и ее применении в различных областях науки и техники. Упрощения, иногда дающие возможность зримо, «на пальцах» изложить некоторые положения квантовой механики, в данном случае неприемлемы, так как выпускники нашего университета в своей практике будут иметь дело с приборами и устройствами, работающими на квантовомеханических принципах. Тем более что в современной, бурно развивающейся информатике грядет эра квантовых компьютеров, и постепенно цивилизация переходит на технические устройства, в которых «строительным кирпичиком» является небольшая группа атомов, а то и сам атом (нанoeлектроника). Здесь без знания принципов квантовой теории просто не обойтись. Кроме того, квантовая теория дает наиболее общий взгляд на устройство всего мироздания, и законы классической физики можно рассматривать как частные случаи или приближения

этой теории. В раздел, посвященный статистической физике, впервые введена лекция по основным идеям, составляющим суть современной теории критических явлений.

*В этих лекциях, выражаясь словами Р. Фейнмана, «...я буду рассказывать, как устроена Природа, но если вам не нравится, как она устроена, это будет мешать вашему пониманию. Физики научились решать эту проблему: они поняли, что нравится им теория или нет – неважно. Важно другое – даёт ли теория предсказания, которые согласуются с экспериментом... Тут не имеет значения, хороша ли теория с философской точки зрения, легка ли для понимания, безупречна ли с точки зрения здравого смысла ...»*



## **1. Предпосылки создания новой теории микромира**

То, что человечество узнало о законах природы до XX века, носит название классической физики. Она дает количественное описание природы на макроскопическом уровне, когда микроструктуру материи можно не учитывать. В классической физике материя представлена двумя не связанными между собой формами: веществом, состоящим из дискретных частиц, описываемых уравнениями Ньютона, и непрерывным электромагнитным излучением, описываемым уравнениями Максвелла. Единое описание природы, согласованное с универсальным принципом атомизма на микроуровне и вместе с тем приводящее к качественно различным макроскопическим формам материи, было достигнуто в рамках квантовой физики – одного из величайших достижений человеческого разума в XX веке. Создание квантовой механики началось с решения двух проблем: построения теории равновесного теплового излучения абсолютно черного тела и интерпретации линейчатых спектров излучения атомов.

Согласно законам классической статистической физики, во всякой системе, находящейся в состоянии термодинамического равновесия, энергия распределяется равномерно по всем степеням свободы. Поскольку у электромагнитного поля число степеней свободы бесконечно велико, то отсюда следовал парадоксальный и не соответствующий экспериментам вывод, что система частиц (имеющая всегда конечное число степеней свободы) не может находиться в равновесии с электромагнитным полем.

С другой стороны, очевидно, что равновесие между излучением и веществом должно быть естественным фактом, так как установлено, что при повышении температуры интенсивность излучения растет. Если, например, равновесие нарушено и тело излучает энергии больше, чем поглощает, то это приводит к понижению температуры тела (внутренняя энергия уменьшается). Понижение температуры прекратится в тот момент, когда излучаемая и поглощаемая энергии будут равны. И, наоборот, если тело излучает энергии меньше, чем поглощает, то за счет большой поглощаемой энергии его температура будет возрастать. Повышение температуры прекратится, когда опять же излучаемая и поглощаемая энергии сравняются. Для анализа этой проблемы и рассмотрения истории ее решения введем соответствующие энергетические характеристики поля, излучаемого веществом.

Излучательную способность тела  $r_{\omega,T}$  определим следующим образом:

$$r_{\omega,T} = \frac{dR_{\omega,T}}{d\omega}, \quad (1)$$

где  $dR_{\omega,T}$  – поток энергии, испускаемый единицей поверхности тела в интервале частот  $d\omega$ .

Энергетическая светимость  $R_T$ , представляющая собой поток энергии, испускаемый единицей поверхности излучающего тела по всем направлениям, в свою очередь может быть определена формулой

$$R_T = \int_0^{\infty} r_{\omega,T} d\omega. \quad (2)$$

Поглощательная способность тела  $\alpha_{\omega,T}$  определяется из соотношения

$$\alpha_{\omega,T} = \frac{d\Phi'_{\omega}}{d\Phi_{\omega}}, \quad (3)$$

где  $d\Phi_\omega$  – поток электромагнитной энергии, падающий на элементарную площадку;  $d\Phi'_\omega$  – часть этого потока, поглощенная телом. Здесь опять же речь идет о потоках электромагнитных волн, частота которых лежит в интервале от  $\omega$  до  $\omega + d\omega$ .

Если тело полностью поглощает всю падающую на него энергию, то оно называется абсолютно черным. В этом случае  $\alpha_{\omega,T} = 1$ . Если  $\alpha_{\omega,T} \equiv \alpha_T < 1$ , то тело называется серым. Кирхгофом был получен закон, устанавливающий связь между излучательной и поглощательной способностями тела:

$$\frac{r_{\omega,T}}{\alpha_{\omega,T}} = \varphi(\omega, T), \quad (4)$$

где функция  $\varphi(\omega, T)$  не зависит от природы тела и является универсальной функцией частоты и температуры.

Для абсолютно черного тела ( $\alpha_{\omega,T} = 1$ ;  $R_T \equiv R'_T$ ) справедлив закон Стефана – Больцмана

$$R'_T = \int_0^\infty \varphi(\omega, T) d\omega = \sigma T^4, \quad (5)$$

где коэффициент  $\sigma$  называется постоянной Стефана – Больцмана, численное значение которой равно  $5,7 \cdot 10^{-8}$  Вт/(м<sup>2</sup> · К<sup>4</sup>). Для удобства рассуждений введем плотность энергии излучения  $u(T)$  и ее спектральную компоненту  $u(\omega, T)$ :

$$u(\omega, T) = \frac{4}{c} \varphi(\omega, T), \quad (6)$$

где  $c$  – скорость света.

Экспериментальная зависимость  $u(\nu, T)$  от частоты приведена на рис.1.

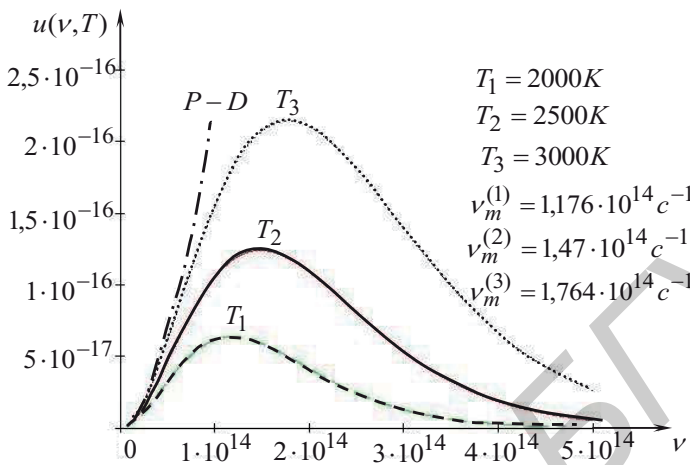


Рис.1

Однако совершенно не простым оказалось теоретически оценить поведение спектральной плотности энергии в зависимости от частоты. Первую попытку в этом направлении в 1893 г. предпринял В. Вин. Он показал, что равновесную спектральную плотность энергии излучения можно представить следующей функцией:

$$u(\omega, T) = A\omega^3 e^{-\frac{a\omega}{T}}, \quad (7)$$

где  $A$ ,  $a$  – постоянные величины.

Из этой формулы следует так называемый закон смещения Вина:

$$T \cdot \lambda_m = b, \quad (8)$$

где  $\lambda_m$  – длина волны, на которую приходится максимум спектральной плотности излучения,  $b = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}$ .

Таким образом, при увеличении температуры максимум спектральной плотности энергии излучения сдвигается в сторону более коротких волн (или в более высокочастотную область спектра).

Исходя из теоремы о равновесном распределении энергии по степеням свободы в системе стоячих электромагнитных волн в замкнутом объеме, Рэлей и Джинс получили явное выражение для  $u(\omega, T)$ :

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_A T, \quad (9)$$

где  $k_A$  – постоянная Больцмана, равная  $1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К. При низких частотах теоретическая зависимость  $u(\omega, T)$  (9) хорошо согласуется с экспериментом. Однако, при высоких частотах наблюдается существенное различие в поведении экспериментальной и теоретической зависимостей (см. рис.1). Действительно, согласно закону Рэля–Джинса при  $\omega \rightarrow \infty$  величина  $u(\omega, T)$  становится бесконечной. В эксперименте же спектральная плотность энергии излучения достигает максимума при  $\nu = \nu_m$ , а затем начинает убывать, стремясь на бесконечности к нулю. Такая парадоксальная ситуация получила название «ультрафиолетовой катастрофы».

Правильный вид функции  $u(\omega, T)$ , полностью совпадающей с экспериментом, в 1900 г. получил М. Планк. Размышляя над проблемой «состыковки» степеней свободы твердого тела и электромагнитного поля, этим телом излучаемого, Планк взял за основу подход Рэля и Джинса в модельном представлении волн в замкнутом объеме. Однако в качестве средней энергии колебания вместо классического значения  $k_A T$  он предложил нечто совсем неслыханное и трудно представимое. Ему слово (14.12.1900 г.): «Рассмотрим распределение энергии  $U$  между  $N$  осцилляторами с

частотой  $\nu$ . Если считать, что  $U$  можно делить беспрестанно, то возможно бесконечное число распределений (и тогда возникает проблема, обозначенная в начале этого раздела – Н.К.). Мы полагаем, однако – и это существенный момент всех наших вычислений, – что  $U$  состоит из вполне определенного числа конечных равных частей. Мы используем мировую константу  $h = 6,55 \cdot 10^{-27}$  эрг·с (в настоящее время принято значение  $h = 6,626 \cdot 10^{-27}$  эрг·с – Н.К.). Эта константа, умноженная на обычную частоту осциллятора  $\nu$ , дает элемент энергии в эргах ...»

Как всегда исключительно ясно, последовательно и детально новую, еще не сформировавшуюся теорию анализирует А. Эйнштейн (речь, произнесенная на 81-м собрании общества немецких естествоиспытателей в Зальцбурге, 1909 г.): «... Так как я не могу предполагать эту теорию общеизвестной, я хочу в краткой форме сообщить самые необходимые сведения о ней.

Внутри полости с температурой  $T$  находится излучение определенного, не зависящего от природы тела состава. В единице объема полости находится количество излучения  $\rho d\nu$ , частота которого лежит между  $\nu$  и  $\nu + d\nu$ . Задача заключается в том, чтобы найти  $\rho$  как функцию  $\nu$  и  $T$ . Если в полости находится электрический резонатор с собственной частотой  $\nu_0$  и незначительным затуханием, то электромагнитная теория излучения позволяет вычислить среднюю по времени энергию  $\bar{E}$  резонатора как функцию  $\rho(\nu_0)$ . Благодаря этому задача сводится к определению  $\bar{E}$  как функции температуры. Но последняя задача, в свою очередь, сводится к следующей. Пусть в полости находится

очень много  $N$  резонаторов с частотой  $\nu_0$ . Как зависит энтропия этой системы резонаторов от ее энергии?

Чтобы решить этот вопрос, Планк применяет общее соотношение между энтропией и вероятностью состояния, выведенное Больцманом в его исследованиях по теории газов. В общем случае энтропия равна  $k \ln W$ , где  $k$  – универсальная постоянная и  $W$  – вероятность рассматриваемого состояния. Эта вероятность измеряется числом комплексий, т. е. числом, которое указывает, каким количеством различных способов можно реализовать рассматриваемое состояние. В случае упомянутой выше постановки вопроса состояние системы резонаторов определяется ее полной энергией, так что интересующий нас вопрос гласит: сколько разных способов распределения энергии между  $N$  резонаторами при заданной полной энергии может существовать? Чтобы найти это число, Планк делит полную энергию на равные порции величиной  $\varepsilon$ . Комплексия определяется тем, что указывается, сколько порций  $\varepsilon$  приходится на каждый резонатор. Затем определяется количество таких распределений, дающих заданную полную энергию, и приравнивается  $W$ . Затем из закона смещения Вина, выводимого термодинамическим путем, Планк заключает, что необходимо положить  $\varepsilon = h\nu$ , причем  $h$  означает число, независимое от  $\nu$ . Таким способом он находит свою формулу излучения, подтвержденную всеми выполненными до сих пор опытами.

Теория Планка ведет к следующему предположению. Если излучающий резонатор в самом деле может иметь только значения энергии, кратные  $h\nu$ , то напрашивается предположение, что

*излучение испускается и поглощается вообще только квантами с такой энергией».*

В своей Нобелевской речи, произнесенной в Стокгольме 11 декабря 1911 г. В. Вин подчеркивал: «... Планку принадлежит заслуга введения в теорию новых гипотез, которые дают нам возможность избежать необходимости признания закона Рэлея (имеется в виду закон Рэлея–Джинса – Н.К.). Последний для длинных волн, несомненно, верен, и правильная формула излучения должна, во всяком случае, иметь такую форму, чтобы для длинных волн она переходила в формулу Рэлея, а для коротких – в данный мною закон. Планк поэтому сохраняет в качестве исходной точки распределение энергии по степеням свободы системы. Но он подвергает это распределение энергии одному ограничению, вводя знаменитую гипотезу об элементах энергии: по этой гипотезе энергия не обладает неограниченной делимостью, а может распределяться лишь в некоторых далее неделимых количествах».

Итак, «Планк ввел понятие гармонического осциллятора с частотой  $\omega$  для представления собственного колебания, или моды, электромагнитного поля с частотой  $\omega$  в полости. Осциллятор следует ассоциировать с электромагнитным полем, а не со стенками полости» (Ч. Киттель).

Мы не будем обсуждать здесь правомочность введения М. Планком термодинамической температуры для описания статистического распределения по энергиям совокупности мод электромагнитных колебаний.

Как следует из вышеприведенных цитат, энергия такого осциллятора (находящегося внутри полости) определяется целым числом  $\hbar\omega$ :



$$E_n = n\varepsilon_o, \quad (10)$$

где  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ,  $\varepsilon_o = \hbar\omega$ ,  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ,  $\omega = 2\pi\nu$ ,  $\varepsilon_o$  – квант энергии.

Запишем в общем виде выражение для спектральной плотности энергии теплового излучения:

$$u(\omega, T) = p_\omega \cdot \bar{E}, \quad (11)$$

где  $p_\omega$  – плотность числа осцилляторов в замкнутом объеме,  $\bar{E}$  – средняя энергия осциллятора. Величину  $p_\omega$  можно определить из тех соображений, что число колебаний в интервале  $dk$  (где  $k = \frac{\omega}{c}$  – волновое число) пропорционально  $4\pi k^2 dk$  и, кроме того, существуют два независимых колебания, различающиеся поляризацией. Исходя из этого получено

$$p_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (12)$$

Тогда выражение для  $u(\omega, T)$  перепишем следующим образом:

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \bar{E}. \quad (13)$$

Если среднюю энергию осциллятора  $\bar{E}$  определить с точки зрения классической статистической физики (а она равна  $k_A T$ ), то из (13) получим закон Рэлея – Джинса. Среднюю энергию такого осциллятора определим с учетом того, что в равновесном состоянии распределение мод колебаний (осцилляторов) по значениям энергии подчиняется закону Больцмана. И тогда вероятность  $W_n$  того, что энергия осциллятора имеет значение  $E_n$ , может быть записана как

$$W_n = e^{-\frac{E_n}{k_A T}} \left( \sum_n e^{-\frac{E_n}{k_A T}} \right)^{-1}. \quad (14)$$

Среднее значение  $\bar{E}$  определим по известной формуле теории вероятностей

$$\bar{E} = \sum_n W_n E_n. \quad (15)$$

Подставляя в (15) выражение (10) и (14) получим

$$\bar{E} = \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_A T}} - 1}. \quad (16)$$

В конечном итоге с учетом (16) спектральная плотность энергии равновесного теплового излучения (13) запишется в виде следующей формулы:

$$u(\omega, T) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_A T}} - 1}. \quad (17)$$

Это выражение называется законом Планка для равновесного теплового излучения.

При малых частотах, когда  $\hbar \omega \ll k_A T$  закон Планка (17) переходит в закон Рэля – Джинса (9). При больших частотах, когда  $\hbar \omega \gg k_A T$ , из формулы (17) следует

$$u(\omega, T) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\frac{\hbar \omega}{k_A T}}, \quad (18)$$

что хорошо согласуется с экспериментом.

Кроме того, из формулы Планка следуют закон Стефана – Больцмана, закон смещения Вина, а также определяется постоянная Стефана – Больцмана.

Введение М. Планком кванта энергии  $\varepsilon_0$  и следующая из этого дискретность уровней энергии осциллятора, было революционным

шагом в физике. *«И я думаю, – писал впоследствии М.Планк, – что не слишком далеко захожу, утверждая, что этой гипотезой заложен фундамент для новой теории, которой суждено пролить новый свет на частности процессов в мире молекул».* Не «частности процессов в мире молекул» осветила великая идея М.Планка, – она дала людям совершенно новое видение устройства материального мира и явилась базой для нового витка развития цивилизации.

Научное творчество М. Планка представляет огромный интерес также и с методологической точки зрения. Его глубокие рассуждения, излагаемые высоким научным стилем, могут быть приведены как ярчайший пример диалектики познания мира человеком, что гениально подчеркнуто В.И. Лениным: *« ... она (физика) идет к единственно верному методу и единственно верной философии естествознания не прямо, а зигзагами, не сознательно, а стихийно, не видя своей «конечной цели», а приближаясь к ней ощупью, шатаясь, а иногда даже задом»* (выделено нами).

Покажем это на конкретном примере. Вернемся еще раз к идее колеблющегося резонатора (или осциллятора), энергию которого предложил квантовать М. Планк. Если предположить, что находящиеся **далеко друг от друга** материальные осцилляторы (см. цитату Планка) моделируют атомы абсолютно черного тела, то возникает несколько вопросов.

1. Может ли такая концентрация  $N$  этих осцилляторов обеспечить данную конкретную спектральную плотность энергии  $u(\omega, T)$  (ведь  $u(\omega, T)$  должна быть пропорциональна  $N$ ). Об этом в дискуссиях неоднократно говорил В. Вин.

2. Как показал уже сам М. Планк (см. его доклад на I Сольвеевском конгрессе в Брюсселе в 1911 году), а впоследствии

было получено при решении уравнения Шредингера, энергия материального осциллятора кроме  $n\varepsilon_0$  (см. формулу (10)) содержит еще дополнительное слагаемое, так называемую «нулевую» энергию или энергию основного состояния  $\frac{1}{2}\hbar\omega$ . Если теперь в формулу для

определения средней энергии (15) подставить  $E_n = n\varepsilon_0 + \frac{1}{2}\hbar\omega$ , то получится уже несколько другое выражение для  $u(\omega, T)$ :

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^3 \hbar}{\pi^2 c^3 \left( e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \right)} + \frac{\omega^3 \hbar}{2\pi^2 c^3}.$$

Отсюда следует, что при увеличении частоты  $\omega$  последнее слагаемое формально будет самым бесперомонным образом «задирать» хорошо спадающие «хвосты» планковского распределения. Получается, что у «хорошего» осциллятора (или резонатора) не должно быть «нулевой» энергии  $\frac{1}{2}\hbar\omega$ . Кроме того, в

этом же русле рассуждений находится современная интерпретация закона теплового излучения Планка  $u(\omega, T) = \frac{2\omega^2}{\pi c^3} \hbar\omega \cdot \bar{n}$ , где

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}, \quad \bar{n} - \text{среднее число бозонов.}$$

Тогда совершенно логично предположить, что  $\hbar\omega$  – это энергия бозе-частицы, а множитель  $\frac{2\omega^2}{\pi c^3}$  характеризует, соответственно, плотность этих бозе-частиц в интервале энергий. Интересно, что у самого М. Планка материальный осциллятор приобретает «нематериальные» свойства излучения: *«При этом получился*

замечательный результат, что это отношение совершенно не зависит от природы резонатора, даже от его постоянной затухания – обстоятельство, особо благоприятное и радостное для меня, так как благодаря ему всю проблему можно было упростить, **заменяя энергию излучения энергией резонатора**, отчего запутанная система со многими степенями свободы заменилась простой системой с одной-единственной степенью свободы» (Нобелевская речь М. Планка 02.07.1920).

Отсюда следует, что осциллятор вводится как вспомогательный модельный элемент для описания свойств электромагнитного поля. «Таким образом, законы теплового излучения сведены к нахождению **вероятности  $W$  определенного значения  $E$  лучистой энергии ...**» (М. Планк, I Сольвеевский конгресс, 1911 г.).

Проблема интерпретации линейчатых спектров восходит к 1885 г., когда Бальмер показал, что длины волн  $\lambda$  известных в то время спектральных линий атомарного водорода могут быть представлены формулой

$$\lambda = B \frac{n^2}{n^2 - 4}, \quad n=3, 4, 5, \dots, \quad (19)$$

где  $B$  – некоторая постоянная.

Позднее Ридберг переписал эту закономерность в следующем виде:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{4}{B} \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (20)$$

Обозначая через  $\chi$  обратную длину волны  $\frac{1}{\lambda}$ , связанную с частотой  $\nu$  через скорость света  $c$ ,  $\nu = c\chi$ , получим соотношение

$$\chi = R' \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (21)$$

или

$$\chi = \frac{R'}{2^2} - \frac{R'}{n^2}. \quad (22)$$

Ритцем было показано, что не только серия Бальмера, но и другие серии спектральных линий атомного водорода могут быть представлены общей формулой

$$\chi = \frac{R'}{n'^2} - \frac{R'}{n^2} = T_{n'} - T_n, \quad (23)$$

$n - n' \geq 1$ ;  $T_n$  – называется термом. Эта формула записывается еще в следующем виде:

$$\nu = R \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (24)$$

$R$  и  $R'$  называются постоянными Ридберга,  $R = cR'$ ;  $R = 3,288 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ .

Серии образуются в соответствии с (23), (24) следующим образом (табл.1):

Таблица 1

| Серия          | $n'$ | $n$       |
|----------------|------|-----------|
| Лаймана        | 1    | 2, 3, ... |
| Бальмера       | 2    | 3, 4, ... |
| Ритца – Пашена | 3    | 4, 5, ... |
| Брэккета       | 4    | 5, 6, ... |
| Пфунда         | 5    | 6, 7, ... |
| Хэмфри         | 6    | 7, 8, ... |

Формула (24) выражает закон, называемый комбинационным принципом. Он находится в резком противоречии с основными положениями классической механики и электродинамики. Действительно, движущийся вокруг ядра электрон, имея нормальное

ускорение  $a_e$ , должен терять на излучение энергию  $\varepsilon$ , определяемую соотношением

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = -\frac{2}{3} \cdot \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 c^3} a_e^2, \quad (25)$$

где  $e$  – заряд электрона;  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная (не путать с квантом энергии в формуле (10)). В результате таких потерь энергии электрон обязан за очень малое время упасть на ядро, чего на самом деле не наблюдается. Строгое решение этой проблемы было найдено в рамках квантовой теории на базе уравнения Шредингера.

XVIII и XIX вв. были ознаменованы триумфальными взлетами волновой теории света. Разнообразные явления интерференции и дифракции могли быть объяснены только на основе волнового подхода и гипотеза Ньютона (который «гипотез не измышлял») о корпускулярной природе света была надолго забыта. И только в 1905 г. для объяснения явления фотоэффекта пришлось вновь обратиться к ньютоновской идее. Как известно, фотоэффект (внешний) заключается в испускании рядом веществ электронов при воздействии света, падающего на поверхность. Наблюдающиеся закономерности этого физического явления в принципе не могут быть объяснены с точки зрения волновой теории света. При составлении закона сохранения энергии для фотоэффекта А. Эйнштейн предположил, что свет поглощается и излучается квантами  $\hbar\omega$ . Кроме того в 1905 году А. Эйнштейн, беря за основу идею М. Планка о квантовании энергии, высказал следующее предположение: «...энергия пучка света, вышедшего из некоторой точки, не распределяется непрерывно во все возрастающем объеме, а складывается из конечного числа **локализованных в пространстве** (выделено нами) неделимых

квантов энергии, поглощаемых и возникающих только целиком». Свои рассуждения Эйнштейн аргументирует тем фактом, что «... теория Планка в действительности неявно использует упомянутую выше гипотезу световых квантов». Для доказательства этого он проходит в обратном направлении тот путь, который прошел Планк, при создании своей теории равновесного теплового излучения и делает следующий вывод: «Кроме пространственных неравномерностей в распределении количества движения излучения, вытекающих из волновой теории, существуют еще и другие неравномерности, которые при малой плотности энергии излучения намного превосходят неравномерности, упомянутые первыми». И далее в статье: «Теория квантов света и проблема локализации электромагнитной энергии» он окончательно приходит к мысли, что «... излучение ведет себя так, как если бы его энергия была локализована в  $\frac{E_0}{h\nu}$  точках ( $E_0$  – энергия электромагнитного излучения, заключенная в объеме  $V$ ,  $h$  – постоянная Планка,  $\nu$  – частота), движущихся независимо друг от друга. Отсюда следует, что излучение, если принять во внимание локализацию его энергии, должно обладать **структурой** (выделено мною – Н.К.), которая не вытекает из обычной теории».

Отметим сразу, что в своих рассуждениях Эйнштейн не уточнил, можно ли обнаружить электромагнитное поле между квантами (или фотонами, как их назвал в 1926 году Льюис). Созданная впоследствии квантовая теория поля использовала «внешнюю» сторону этой идеи. Действительно, разложение электромагнитного поля по собственным типам колебаний или модам приводит к тому, что его энергия может быть представлена как сумма энергий отдельных мод. Переходя от



фурье-образов вектора-потенциала  $\vec{A}$  (амплитуды в фурье-разложении) к обобщенным координатам и импульсам получают поле, как совокупность гармонических осцилляторов. Если теперь по известной процедуре обобщенные координаты и импульсы заменить соответствующими операторами, то оператор Гамильтона электромагнитного поля может быть записан как сумма гамильтонианов квантовых осцилляторов. Дальнейшее введение операторов рождения ( $\hat{a}^*$ ) и уничтожения ( $\hat{a}$ ) фотонов приводит в итоге к конечной формуле квантовой теории поля

$$E_n = (n + \frac{1}{2})h\nu,$$

где  $n$  – число фотонов с энергией  $h\nu$ . При этом  $n$  является собственным значением оператора  $\hat{a}\hat{a}^*$ .

Эта формула в точности соответствует выражению для собственных значений оператора Гамильтона квантового одномерного гармонического осциллятора.

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x),$$

где  $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ ,  $\hat{p}_x$  –  $x$ - проекция оператора импульса,  $m$  – масса осциллятора,  $\omega = 2\pi\nu$ ,  $\psi(x)$  – волновая функция.

Как очевидно из вышеприведенных рассуждений у квантовой теории поля нет физического наполнения, свидетельствующего о наличии структуры самого поля. Энергия и импульс, передаваемые при взаимодействии поля с веществом, четко присутствуют в волновой теории Максвелла и наличие этих характеристик у фотона,

представляющего в определенном выше смысле моду излучения, не является новым качеством.

Структуру любого материального объекта, будь это поле или вещество можно установить лишь, введя соответствующую систему координат. И для квантов электромагнитного поля – фотонов здесь возникает проблема. Напомним сначала, что масса покоя фотона равна нулю. Очевидно, что это обстоятельство не позволяет сформировать из таких объектов многообразия, на котором можно установить метрическую протяженность (переход от одной структурной единицы многообразия к другой). Установление же метрической протяженности (а, следовательно, и структурных особенностей рассматриваемого объекта) требует в свою очередь, как указывалось выше, введения системы координат, которая по вполне понятным причинам не может быть связана с фотонами, движущимися со скоростью света. Следовательно, такие объекты как фотоны в принципе существовать не могут (на основании чего можно установить факт их локализации в пространстве?).

С другой стороны хорошо подтвержденным экспериментальным фактом является квантование взаимодействия поля и вещества (именно взаимодействия, так как фундаментальная постоянная  $h$  является квантом действия). Вещество, в силу специфики связанного состояния составляющих его элементов, поглощает и излучает поле порциями, имеющими энергию  $h\nu$  и импульс  $\frac{h\nu}{c}\vec{n}$ . И здесь будет весьма к месту упомянуть образное сомнение М. Планка в существовании неделимых порций энергии электромагнитного поля: если пиво из бочки черпать кружками объемом, например, 0,5 литра,

то это не значит, что пиво в бочке существует в виде совокупности таких порций по 0,5 литра.

Однако, тем не менее, в расчетах, оказалось полезным представлять световой поток в виде выше указанных квазичастиц-фотонов, «взаимодействующих» с отдельными структурными элементами вещества. Такой искусственный формализм позволяет более эффективно и наглядно описывать целый ряд процессов и явлений, связанных с взаимодействием электромагнитного излучения с веществом. В случае фотоэффекта энергия поглощенного веществом кванта света  $\hbar\omega$  идет на совершение работы выхода  $A$  электрона из вещества, сообщение ему кинетической энергии  $T$  и на потери энергии в веществе  $E_1, E_2$ :

$$\hbar\omega = A + T + E_1 + E_2, \quad (26)$$

где  $E_1$  – потери энергии на столкновение электронов между собой и атомами;  $E_2$  – энергия ионизации.

В 1922 г. А. Комптон, рассматривая рассеяние рентгеновского излучения на электронах, для интерпретации результатов эксперимента предположил, что квант излучения рассеивается на электроне целиком, как в случае столкновения двух бильярдных шаров. Рассеяние рентгеновских лучей осуществляли в веществах, где электроны слабо связаны с ядром (парафин, графит). В этом случае при большой энергии кванта рентгеновского излучения по крайней мере для внешних электронов их энергией связи можно пренебречь и рассматривать как свободные покоящиеся частицы.

Для такой системы можно записать:

$$\vec{p}_\gamma + \vec{p}_e = \vec{p}'_\gamma + \vec{p}'_e; \quad (27)$$

$$E_\gamma + E_e = E'_\gamma + E'_e, \quad (28)$$

где  $\vec{p}_\gamma$ ,  $\vec{p}_e$  – соответственно импульсы кванта излучения и электрона;  $E_\gamma$ ,  $E_e$  – соответствующие энергии. Величины без штрихов характеризуют систему до столкновения, штрихованные, соответственно, после столкновения.

Решая совместно уравнения (27) и (28) с учетом релятивистских эффектов, А. Комптон получил, что при рассеянии рентгеновского излучения на электроны происходит изменение длины волны  $\Delta\lambda$ :

$$\Delta\lambda = \frac{4\pi\hbar}{m_e c} \sin^2 \frac{\Theta}{2}, \quad (29)$$

где  $\Theta$  – угол между импульсом исходного и рассеянного кванта. В этих расчетах предполагается наличие у кванта рентгеновского излучения импульса  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ , где  $\vec{k} = \frac{\omega}{c}\vec{n}$ ,  $\vec{n}$  – единичный вектор, направление которого совпадает с направлением движения кванта.

Серьезная проблема обозначилась также и при описании движения микрочастиц. Движение частиц и их систем в классической физике, как известно, описывается законом Ньютона:

$$\sum_i \vec{F}_i = m\vec{a}, \quad (30)$$

где  $\vec{F}_i$  – силы, действующие на тело;  $\vec{a}$  – ускорение,  $\vec{a} = \frac{d^2\vec{S}}{dt^2}$ .

Решая это дифференциальное уравнение, мы получим, в частности, закон движения частицы, то есть последовательность точек, проходимых при движении. Однако такой подход оказался не универсальным и эксперименты показывают, что при уменьшении размеров движущейся частицы ей нельзя приписать определенное положение в пространстве. Рассмотрим в связи с этим движение

микрочастиц через две близко расположенные щели в экране и проанализируем их дальнейшее поведение (рис.2).

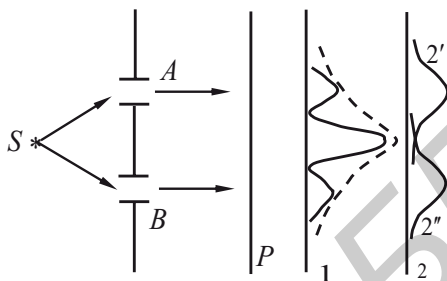


Рис.2

Пусть, например, электроны испускаются источником  $S$  и после прохождения двух, имеющихся в экране щелей  $A$  и  $B$ , поглощаются фотопластинкой  $P$ . Было обнаружено, что в результате поглощения большого числа частиц, на пластинке  $P$  возникает дифракционная картина 1, совершенно не похожая на картину 2, которая возникает на фотопластинке, когда сначала закрывают щель  $A$ , а затем на то же время – щель  $B$  ( $2'$  – закрыта щель  $B$ ,  $2''$  – закрыта щель  $A$ ).

Уменьшая должным образом интенсивность источника, можно убедиться, что дифракционные полосы образуются в результате последовательных ударов отдельных частиц, каждая из которых поглощается в определенной точке пластинки  $P$ . Кроме того, оказывается, что уменьшение интенсивности источника не изменяет характера дифракционной картины, поэтому исключается влияние частицы, проходящей через одну щель, на частицу, проходящую через вторую щель.

Если бы частицы представляли собой движущиеся точки, каждая из которых должна пройти либо через щель  $A$ , либо через щель  $B$  (но не через обе щели сразу), то тогда дифракционная картина, возникающая при прохождении равного числа частиц через каждую из щелей, не зависела бы от того, открыта или закрыта в это время другая щель. Следовательно, когда открыты обе щели, мы должны исключить возможность того, что частица, проходя сквозь экран, обладает определенным положением (либо  $A$ , либо  $B$ ). С другой стороны, очевидно, что каждая частица попадает в определенную точку пластинки  $P$ . Таким образом, мы можем лишь заключить, что частица не имеет определенного положения, за исключением тех мест, где расположены экспериментальные устройства для ее регистрации. Отсюда следует, что прохождение частицы сквозь щели  $A$  и  $B$  экрана есть волновой процесс. В этой связи мы не в состоянии даже предсказать, через какую именно щель проходит данная частица, так как в месте расположения экрана она не имеет определенного положения. Конечно, если передвинуть пластинку непосредственно к экрану, то можно экспериментально убедиться в том, что данная частица прошла через эту, а не через другую щель. Однако это изменит наше экспериментальное устройство и воспрепятствует наблюдению дифракционных полос, то есть разрушит само явление дифракции.

Было очевидно, что в фундамент новой теории необходимо положить качественно иные понятия и категории, на базе которых возможна непротиворечивая интерпретация результатов экспериментов. *«И если эти понятия покажутся непривычными, а в некоторых случаях даже абсурдными, то это никоим образом не должно смущать нас. Главное, чтобы предсказания теории*

совпадали с экспериментом. Ведь не смущает же нас такое понятие, как плотность населения в стране, равная, например, 29,3 человека на квадратный километр. Мы не сможем вразумительно объяснить, что такое 29,3 человека, находящиеся на этом квадратном километре, так как физического смысла эта величина не имеет. Но главное то, что величина 29,3, умноженная на площадь всей территории, позволяет получить количество людей, проживающих в этой стране, что имеет вполне определенный физический смысл» (Р. Фейнман). И таких примеров можно привести достаточно много.

Такое поведение микрочастиц во всех тонкостях аналогично дифракции волн на щелях, и в связи с этим Луи де Бройль в 1923 г., основываясь на единстве природы в микромире, предложил рассматривать движущуюся микрочастицу как некую волну  $\psi$ , распространяющуюся в пространстве и ведущую себя в соответствии с таким (волновым) статусом:

$$\psi(x,t) = Ce^{-i(\omega t - kx)}, \quad (31)$$

где  $C$  – некоторая комплексная постоянная;

$$\omega = \frac{E}{\hbar}; \quad k = \frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda}; \quad \lambda = \frac{h}{p}, \quad (32)$$

где  $\omega$  – частота волны де Бройля;  $k$  – волновое число;  $E$  – энергия частицы;  $p$  – ее импульс;  $\lambda$  – длина волны де Бройля.

Формулы (32) представляют собой связь между волновыми  $(\omega, k)$  и корпускулярными  $(E, p)$  характеристиками процесса распространения частицы.

Революционная гипотеза де Бройля в скором времени (1927 г.) была блестяще подтверждена в многочисленных экспериментах по

дифракции микрочастиц (электронов, атомов, молекул) Дэвиссоном, Джермером, Тартаковским, Томсоном, Штерном, Эстерманом и др.

Для выяснения более глубоких закономерностей, связанных с волновой природой микрочастиц, А.Д. Суханов предлагает провести более подробное сопоставление опытов по дифракции с одиночными электронами и с потоком «одинаковых» электронов: *«До сих пор мы сравнивали лишь вероятности прохождения одиночных электронов через различные щели в целом, по существу не вдаваясь в детали их распределения по экрану. Этого оказалось достаточно, чтобы убедиться в том, что способностью к интерференции обладает даже одиночный электрон. Вместе с тем, очевидно, что сам по себе одиночный электрон не в состоянии дать на экране целостную дифракционную картину, ибо, согласно принципу атомизма, он всегда регистрируется локально. Однако при длительном наблюдении обнаруживается полное соответствие между распределением вероятностей попадания на экран одиночных электронов и распределением чисел попавших на экран электронов в потоке «одинаковых» электронов. Подобное соответствие, разумеется, не случайно. Здесь заключена глубокая физическая идея, которую мы раньше не подчеркивали. Волновыми свойствами обладает каждый электрон, но эти свойства потому и носят вероятностный характер, что они отражают его принадлежность к совокупности (ансамблю) «одинаковых» электронов. Поэтому для более наглядного проявления волновых свойств одиночного электрона необходимо проводить наблюдения над всем ансамблем. Тем самым волны де Бройля одновременно являются характеристикой и одиночного электрона, и ансамбля «одинаковых» электронов. В опытах по дифракции наша уверенность в «одинаковости» всех*



одиночных электронов была основана на том, что эти электроны специально отбирались или «приготавливались» к измерению. Практически это делалось с помощью макроскопического устройства, выделявшего электроны с одинаковыми физическими характеристиками  $E$  и  $\vec{p}$ ). После такого отбора каждый одиночный электрон способен проявить на опыте лишь те свойства, которыми он потенциально обладает как член определенным образом подготовленного ансамбля «одинаковых» электронов».

Задачей номер один теперь стало создание физико-математического формализма, с помощью которого оказалось бы возможным описание столь необычного поведения микрочастиц. Нам нужно получить уравнение, дополнив которое начальными и граничными условиями для волновой функции  $\psi(\vec{r}, t)$ , мы могли бы получить развитие физического состояния микрообъекта в пространстве и времени.

## 2. Уравнение Шредингера

Есть ли другой способ описания движения частицы в пространстве, отличный от (30)? Рассмотрим ансамбль, состоящий из  $N$  частиц, и для его описания введем конфигурационное  $3N$ -мерное пространство. В таком пространстве состояние всего ансамбля будет представлено изображающей точкой. Пусть эволюция данной системы, находящейся во внешнем поле  $U$ , происходит в течение определенного времени  $\tau$ . Разобьем  $\tau$  на интервалы, разделенные моментами времени  $t_1, t_2, t_3, \dots$  (в пределе – бесконечно малые интервалы). Каждому моменту  $t_i$  в конфигурационном пространстве будет соответствовать точка, характеризуемая радиусом-вектором  $\vec{r}^{(i)} = (\vec{r}_1^{(i)}, \vec{r}_2^{(i)}, \dots, \vec{r}_N^{(i)})$ . Здесь  $\vec{r}^{(i)}$  –  $3N$ -мерный вектор. «Газ» таких точек будем характеризовать их плотностью  $w$  (число точек в единице объема конфигурационного пространства). Вероятность  $dW$  того, что система частиц находится в элементе объема  $dV$  такого пространства, можно формально представить как

$$dW = w dV, \quad (33)$$

где  $dV = dx_1 dy_1 dz_1 \cdot dx_2 dy_2 dz_2 \cdot \dots \cdot dx_N dy_N dz_N$ ,  $w$  – определяет плотность вероятности.

Стационарное течение точек «газа» в этом случае может быть описано обычным уравнением непрерывности

$$\frac{\partial w(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0, \quad (34)$$

где

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = w(\vec{r}, t) \cdot \vec{v}, \quad (35)$$

$\vec{v}$  – 3N – мерная скорость,  $\vec{j}$  плотность потока «газа»,  $\vec{v} = \sum_{i=1}^{3N} \vec{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i}$

Величина  $w(\vec{r}, t)$  как обычно нормируется условием .

$$\int w(\vec{r}, t) dV = 1$$

Известно, что распространение электромагнитных волн в среде характеризуется волновыми уравнениями для векторов  $\vec{E}$  и  $\vec{H}$ . В частности, для вектора  $\vec{E}$  в свободном пространстве без источников можно записать:

$$\frac{\partial^2 \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} - v_S^2 \Delta \vec{E}(\vec{r}, t) = 0, \quad (36)$$

где  $v_S$  – скорость электромагнитной волны в среде;  $\Delta$  - оператор Лапласа. Интенсивность  $\mathfrak{S}$  электромагнитного поля, как известно, пропорциональна

$$\mathfrak{S} \sim \vec{E} \cdot \vec{E}^*, \quad (37)$$

где звездочка означает комплексное сопряжение.

Величина  $w$  в формуле (33) также характеризует интенсивность числа изображающих точек в процессе эволюции системы частиц. Поэтому по аналогии с (37) представим величину  $w$  как  $\psi\psi^*$ , где функция  $\psi$  будет характеризовать амплитуду вероятности развития системы N точек в конфигурационном 3N-мерном пространстве с течением времени.

Попытаемся теперь определить уравнение для  $\psi$ , которое описывало бы эволюцию  $\psi$  в пространстве и во времени аналогично тому как уравнение (36) описывает развитие  $\vec{E}(\vec{r}, t)$ . Для этого представим скорость  $\vec{v}$  в следующем виде:

$$\vec{v} = A\bar{\nabla} \ln \frac{\psi}{\psi^*} = A \left( \frac{\bar{\nabla}\psi}{\psi} - \frac{\bar{\nabla}\psi^*}{\psi^*} \right). \quad (38)$$

С учетом (38) плотность потока  $\vec{j}$  (35) можно переписать как

$$\vec{j} = A(\psi^* \bar{\nabla}\psi - \psi \bar{\nabla}\psi^*). \quad (39)$$

Подставляя (39) в (34) получим

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + A\Delta\psi + \Phi\psi = 0, \quad (40)$$

где величины  $A$  и  $\Phi$  предстоит определить из дополнительных условий.

В дальнейших рассуждениях ограничимся случаем движения одной частицы теперь уже в трехмерном декартовом пространстве. В этой ситуации в рамках данного формализма следует предположить, что величина  $\psi(\vec{r}, t)$  распределена по определенному объему и в описательном отношении частица как бы «размазана» по пространству (траектория как таковая отсутствует).

Таким образом, возможны два способа описания движения частиц: с помощью уравнений (30) и (40), каждое из которых наиболее адекватно в зависимости от конкретных условий задачи. Взаимоотношения между этими двумя подходами можно

проиллюстрировать на примере взаимосвязи между геометрической (лучевой) и волновой оптикой при описании распространения света.

В волновой оптике световое поле представляет собой волновой процесс и описывается векторами напряженностей электрического и магнитного полей, которые в свою очередь можно определить из уравнений Максвелла. В геометрической же оптике предполагается, что свет распространяется по строго определенным траекториям. Переход от волновой оптики к геометрической осуществляется в пределе  $\lambda \rightarrow 0$  ( $\lambda$  - длина световой волны). Амплитуду электрического поля в электромагнитной волне возьмем в виде  $E = E_0 e^{i\varphi}$ . Так как переход к геометрической оптике связан с переходом к малым длинам волн, то это соответствует увеличению фазы  $\varphi$ . В геометрической оптике, кроме того, распространение света осуществляется в соответствии с принципом Ферма, когда разность фаз в начальной и конечной точках минимальна.

Возвращаясь к проблеме описания движения частиц в пространстве следует отметить, что в классической механике основополагающим в этом отношении является принцип наименьшего действия, когда реальной траекторией тела является та, вдоль которой величина действия  $S$  минимальна (аналогично для разности фаз в геометрической оптике).

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dt, \quad (41)$$

где  $L$  – функция Лагранжа  $L=T-U$ ,  $T$  – кинетическая энергия,  $U$  – потенциальная энергия.  $L$  является функцией обобщенных координат  $q$ , скоростей  $\dot{q}$  и времени  $t$ .

Если в моменты времени  $t_1$  и  $t_2$  система имеет определенные положения, характеризуемые соответственно  $q_1$  и  $q_2$ , то истинное движение между указанными ее положениями будет таким, что величина  $S$  примет минимальное для данных условий значение. Кроме того, изменение действия для механической системы при ее смещении во времени определяет ее полную энергию  $H=T+U$  ( $H$  – функция Гамильтона)

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H \quad (43)$$

Величина  $S$  имеет размерность действия (Дж · с), такую же как и постоянная Планка, характеризующая в этом отношении масштабы микромира. Для произвольной системы отношение  $\frac{S}{h}$  определяет степень приближения ее к микро ( $\frac{S}{h} \leq 1$ ) или макросостоянию ( $\frac{S}{h} \geq 1$ ). Сопоставляя условие минимизации разности фаз в случае принципа Ферма (геометрическая оптика) и минимизации действия в случае принципа наименьшего действия (механика движущейся частицы), можно предположить следующий вид функции  $\psi$  в уравнении (40):

$$\psi = D e^{i \frac{S}{h}}, \quad (44)$$

где  $D$  – постоянная величина.

Это предположение в первую очередь базируется на описанном в разд. 1 волновом характере поведения микрочастиц. Как будет

показано ниже, величина  $\psi$  (44) есть волновая функция квазиклассической физической системы. Она «работает» в рамках действия принципа соответствия, утверждающего совпадение результатов классического и квантового описаний в определенных областях перекрытия. Возрастание  $S$  здесь предполагает переход к классическому описанию движения по траектории, что в свою очередь соответствует  $\lambda \rightarrow 0$  при переходе к геометрической оптике.

Подставляя (44) в уравнение (40), при определенных допущениях получим

$$A = -\frac{i\hbar}{2m}; \quad \Phi = \frac{i}{\hbar}U. \quad (45)$$

С учетом (45) уравнение (40) можно записать в окончательном варианте:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t). \quad (46)$$

Такое уравнение для описания движения микрочастиц в 1926 году предложил Э.Шрёдингер. В этом уравнении волновая функция  $\psi(\vec{r}, t)$  (амплитуда вероятности, вектор состояния,  $\psi$  – функция – с этими названиями она встречается в литературе) характеризует физическое состояние микроскопической системы (ее энергию, импульс, момент импульса, спин). Квадрат ее модуля  $\psi\psi^*$  есть плотность вероятности обнаружить частицу в данной точке пространства. Такой статус  $\psi$  определяет ее свойства **конечности**, **непрерывности** и **однозначности**.

Сразу следует отметить, что «вывод» уравнения Шредингера, приведенный в данном разделе, является только иллюстрацией другого (волнового) способа описания движения частиц.

Уравнение Шредингера можно также представить следующим образом:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t), \quad (47)$$

где  $\hat{H}$  – оператор полной энергии или оператор Гамильтона:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t). \quad (48)$$

Из уравнения (47) следует, что действие оператора  $\hat{H}$  на волновую функцию приводит к ее изменению во времени и поэтому можно записать

$$\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (49)$$

То есть, оператор  $\hat{H}$  есть оператор сдвига во времени.

О сущности операторов как математических объектов и их свойствах будет рассказано ниже.

Если оператор Гамильтона не зависит от времени, то закономерности движения атомных частиц могут быть получены из решения стационарного уравнения Шредингера. Для этого перепишем уравнение (47) для одномерного случая:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}(x) \psi(x, t). \quad (50)$$



При этом возможно разделение переменных волновой функции  $\psi(x, t)$ :

$$\psi(x, t) = \psi(x)f(t). \quad (51)$$

Подставляя (51) в (50), получим:

$$i\hbar \frac{df(t)}{dt} = Ef(t), \quad (52)$$

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x). \quad (53)$$

Уравнение (53) есть уравнение на собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона и называется стационарным уравнением Шредингера. Если обозначить собственные функции через  $\psi_n$ , а собственные значения через  $E_n$ , то выражение для волновой функции  $\psi_n(x, t)$  с учетом решения уравнения (52) будет иметь вид

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}. \quad (54)$$

Таким образом, состояния с определенным значением энергии  $E_n$  гармонически зависят от времени с частотой  $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$ . Такие состояния называются стационарными. Ниже будет показано, что эти состояния («чистые» состояния) описываются ортогональными собственными функциями оператора  $\hat{H}$ , по которым (как по ортам системы координат) можно разложить любое (произвольное, «смешанное») состояние системы.

Так как уравнение (50) линейно, то его общее решение может быть представлено как суперпозиция стационарных состояний:

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}, \quad (55)$$

где амплитуды  $c_n$  определяют через начальную функцию  $\psi(x,0)$ :

$$c_n = \int \psi(x,0) \psi_n^*(x) dx. \quad (56)$$

С другой стороны, стационарные состояния определим как такие состояния, в которых плотность вероятности положения частицы  $\psi^* \psi$  и плотность тока вероятности

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x})$$

не зависят от времени (хотя сама амплитуда вероятности (54) от времени зависит гармонически). В качестве физического примера стационарного состояния системы возьмем два состояния молекулы аммиака  $CH_4$ , изображенные на рис. 3.

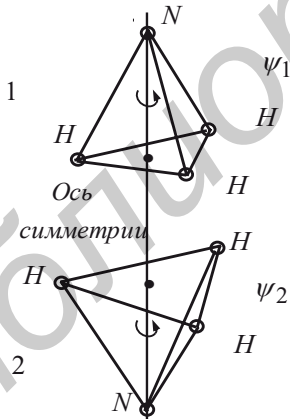


Рис.3

Состояние 1, когда молекула азота вверху, описывается волновой функцией  $\psi_1$  и представляет собой первое стационарное состояние. Состояние 2, когда молекула азота внизу, соответственно описывается волновой функцией  $\psi_2$  и представляет собой второе стационарное состояние. Произвольное состояние молекулы  $\psi$  может быть представлено в

базисе состояний  $\psi_1$  и  $\psi_2$  как

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2, \quad (57)$$

где  $c_1$  и  $c_2$  – в общем комплексные, зависящие от времени множители и, как будет показано ниже, характеризующие вероятность каждого из состояний. Из (57) следует, что произвольное физическое состояние микросистемы  $\psi$  может быть представлено суперпозицией стационарных состояний  $\psi_1$  и  $\psi_2$  с весовыми множителями  $c_1$  и  $c_2$  (принцип суперпозиции).

Обратимся еще раз к аналогиям из волновой оптики. Стационарное уравнение Шредингера можно переписать следующим образом:

$$\Delta\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi(x) = 0. \quad (58)$$

С другой стороны, распространение электромагнитной волны

$$f = A(x)e^{-i\omega t}$$

в среде с коэффициентом преломления  $n$  описывается совершенно аналогичным по форме уравнением:

$$\Delta A(x) + k^2 A(x) = 0, \quad (59)$$

где  $k = nk_0$ ;  $k_0$  – волновое число электромагнитной волны в вакууме;  $n = \frac{k}{k_0} = \frac{\lambda_0}{\lambda}$ . Сравнивая (58) и (59), можно, в определенном смысле, сказать, что уравнение Шредингера описывает распространение амплитуды вероятностей  $\psi(x, t)$  в среде с

коэффициентом преломления  $n = \sqrt{\frac{E-U}{E}}$ . «Преломляющие» свойства среды определяются здесь потенциальной энергией поля  $U(x)$ .

На сегодняшний день квантовая механика далеко отошла от той «сырой» формы, которая имела место в 20–30х годах XX столетия. Она представляет собой строго формализованную систему, базирующуюся на вышеприведенных положениях. Тем не менее квантовая механика полностью сохранила схему классической физики с ее понятиями состояния и динамических переменных, придав им, однако, качественно новый смысл.

### 3. Математические основания квантовой механики

Предмет квантовой механики как теории состоит, в частности, в предсказании результатов физических измерений, которые производятся над микроскопическими системами. В этом смысле сами измерения можно рассматривать как некие операции, производимые над физическими объектами для получения информации об их состоянии. В эксперименте процедура получения информации о физическом состоянии объекта заключается в действии измерительного прибора на исследуемую систему. В описательном подходе квантовой механики этот же процесс представляется действием соответствующего оператора  $\hat{F}$  на волновую функцию  $\psi(\vec{r}, t)$ , представляющую объект и характеризующую его физическое состояние. Таким образом, прибору

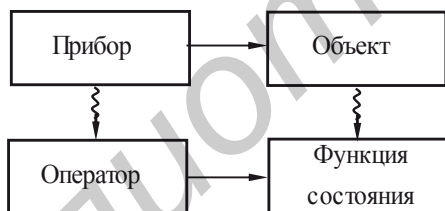


Рис. 4

в эксперименте соответствует оператор в теории, а физическому объекту соответственно функция (или вектор) состояния  $\psi(\vec{r}, t)$ . На рис. 4 представлена схема такого соответствия.

Результатом воздействия оператора  $\hat{F}$  на волновую функцию  $\psi(\vec{r}, t)$  будут собственные значения  $F$  этого оператора, полученные при решении

уравнения на собственные функции и собственные значения:

$$\hat{F}\psi(\vec{r}, t) = F\psi(\vec{r}, t). \quad (60)$$

Определение значений полной энергии  $E$  микросистемы мы уже видели на примере стационарного уравнения Шредингера (53), которое по сути является уравнением на собственные функции и собственные значения оператора полной энергии  $H$  (оператор Гамильтона, или гамильтониан).

Схема, приведенная на рис. 4, является всего лишь наглядной иллюстрацией необходимости привлечения в теоретическую структуру квантовой механики таких математических объектов, как операторы и, конечно же, не отражает глубокого физического смысла, заложенного в их сущности.

Так как измерение различных физических величин, характеризующих атомные системы, осуществляется различными приборами (зачастую несовместимыми между собой), то в описательном отношении каждой физической величине в квантовой механике сопоставляется свой, изображающий ее оператор. И теперь теоретическое определение нужной физической величины осуществляется по известной процедуре получения собственных значений этого оператора из уравнения на собственные функции и собственные значения.

- для любых векторов  $\psi + \varphi = \varphi + \psi$ ;
- существует нулевой вектор  $0$ , такой что  $\psi + 0 = \psi$ ;
- для каждого вектора  $\psi$  существует противоположный вектор  $(-\psi)$ , такой что  $\psi + (-\psi) = 0$ ;

–  $1 \cdot \psi = \psi$ ;  $\alpha(\beta\psi) = \alpha\beta\psi$ ;  $\alpha(\varphi + \psi) = \alpha\varphi + \alpha\psi$ ;

– векторы  $\psi, \varphi, \dots, \chi$  называются линейно независимыми, если равенство

$$\alpha\psi + \beta\varphi + \dots + \gamma\chi = 0 \quad (61)$$

справедливо только тогда, когда все числа  $\alpha, \beta, \dots, \gamma$  равны нулю;

### 3.1. Многомерные линейные пространства операторов

Линейное пространство определяется как совокупность математических объектов  $\psi, \varphi, \eta, \chi, \dots$ , называемых векторами и подчиняющихся следующим условиям:

– суммой двух векторов  $\psi$  и  $\varphi$  называется вектор  $\eta$ , принадлежащий этому множеству, что обозначается как  $\psi + \varphi = \eta$ ;

– произведением комплексного числа  $\alpha$  на вектор  $\varphi$  называется вектор  $\psi$  этого же множества, что обозначается как  $\psi = \alpha\varphi$ ;

– скалярное произведение векторов трехмерного декартова пространства определяется как

$$\begin{aligned}(\vec{a} \cdot \vec{b}) &= |\vec{a}| |\vec{b}| \cos(\widehat{\vec{a} \cdot \vec{b}}); \\(\vec{a} \cdot \vec{b}) &= (\vec{b} \cdot \vec{a}); \\(\vec{a} \cdot \vec{a}) &\geq 0; \quad \vec{a} \cdot (\beta\vec{b} + \gamma\vec{c}) = \beta(\vec{a} \cdot \vec{b}) + \gamma(\vec{a} \cdot \vec{c}); \\(\vec{a} \cdot \vec{a}) &= 0 \text{ только в случае } \vec{a} = \vec{0};\end{aligned}\tag{62}$$

$n$ -мерном пространстве векторов

$$(\varphi \cdot \psi) = \varphi_1^* \psi_1 + \varphi_2^* \psi_2 + \dots + \varphi_n^* \psi_n = \sum_{i=1}^n \varphi_i^* \psi_i;\tag{63}$$

– в системе вещественных функций  $f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x), \dots$  при условии, что интеграл от этих функций в конечном или бесконечном интервале  $a < x < b$ , а также интеграл от их квадрата существуют, скалярное произведение определяется как

$$(f_m, f_n) = \int f_n(x) f_m(x) dx.\tag{64}$$

Скалярное произведение определяется для введения в линейное пространство метрических соотношений.



В квантовой механике, как правило, используются бесконечномерные пространства, а именно такие, которые являются обобщением  $n$ -мерного эвклидова пространства для бесконечномерного случая ( $n = \infty$ ). Такие пространства называются пространствами Гильберта.

Пространство Гильберта задано при условии выполнения следующих требований:

- пространство векторов  $\psi, \varphi, \eta, \dots$  линейно в соответствии с введенными выше положениями;
- пространство бесконечномерно ( $n \rightarrow \infty$ );
- в пространстве определено скалярное произведение

$$(\varphi \cdot \psi) = \sum_{i=1}^{\infty} \varphi_i^* \psi_i, \quad (65)$$

если  $\varphi, \psi, \dots$  – бесконечное множество комплексных чисел  $\varphi = \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_i, \dots\}$ ;

- для множества комплексных функций, квадратично интегрируемых на всем интервале изменения переменной

$$(\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x) \psi(x) dx, \quad (66)$$

причем

$$(\varphi, \alpha\psi + \beta\eta) = \alpha(\varphi\psi) + \beta(\varphi\eta).$$

### 3.2. Линейные самосопряженные операторы

Оператор  $\hat{F}$  представляет собой правило, согласно которому каждому вектору данного пространства  $\psi$  ставится в соответствие вектор  $\varphi$  этого же пространства ( $\hat{F}\psi = \varphi$ ). При действии оператора  $\hat{F}$  на функцию  $\psi$  иногда получается ситуация, когда

$$\hat{F}\psi = F\psi, \quad (67)$$

где  $F$  – какое-то число. Если при этом функция  $\psi$  удовлетворяет условиям конечности, однозначности и непрерывности, а также квадратично интегрируема

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty, \quad (68)$$

то  $\psi$  называется собственной функцией оператора  $\hat{F}$ , а  $F$  – его собственным значением, соответствующим собственной функции  $\psi$ . Если при выполнении соотношения (67) и условия конечности, непрерывности и однозначности  $\psi$  тем не менее условие квадратичной интегрируемости (68) не выполняется, то  $\psi$  называется обобщенной собственной функцией оператора  $\hat{F}$ , а  $F$  – точкой непрерывного сплошного спектра этого оператора.

В квантовой механике уравнения на собственные функции и собственные значения – это, как правило, дифференциальные уравнения. Решения этих уравнений существуют лишь при избранных значениях параметра  $F$  и образуют дискретную совокупность чисел (дискретный спектр собственных значений). Однако встречаются ситуации, когда спектр собственных значений непрерывен. Это будет показано ниже на конкретных примерах.

Задачи о нахождении спектров операторов энергии, импульса, момента импульса, проекций момента импульса, спина частицы образуют фундамент квантовой механики. В квантовой механике применяются линейные самосопряженные операторы. Операторы, удовлетворяющие требованию

$$\hat{F}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\hat{F}\psi_1) + c_2(\hat{F}\psi_2), \quad (69)$$

называются линейными, где  $c_1, c_2$  – комплексные числа.

Суммой операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{S}$  называют оператор  $\hat{P} = \hat{F} + \hat{S}$ , который каждой функции состояния (вектор состояния) ставит в соответствие функцию  $\hat{F}\psi + \hat{S}\psi$ .

Произведением операторов  $\hat{F}$  и  $\hat{S}$  называется оператор  $\hat{R} = \hat{F}\hat{S}$ , удовлетворяющий равенству

$$\hat{R}\psi = \hat{F}(\hat{S}\psi). \quad (70)$$

Следует отметить, что в общем случае произведение операторов некоммутативно:

$$\hat{F}\hat{S} \neq \hat{S}\hat{F}. \quad (71)$$

Оператор  $\hat{K} = \hat{F}\hat{S} - \hat{S}\hat{F}$  называется коммутатором этих операторов.

Закон линейности (69) отражает фундаментальный принцип физики - принцип суперпозиции: при сложении внешних воздействий их результаты **также** складываются.

Для любого линейного оператора  $\hat{F}$  можно построить сопряженный с ним оператор  $\hat{F}^+$  по следующей формуле:

$$\int \psi^* \hat{F} \varphi dX = \int (\hat{F}^+ \psi)^* \varphi dX, \quad (72)$$

$dX = dx_1 dx_2 \dots$  – элементарный объем пространства; звездочкой, как обычно, обозначены комплексно-сопряженные величины.

В том случае, когда оператор, сопряженный с данным, совпадает с ним, он называется самосопряженным, или эрмитовым (по имени французского математика Ш. Эрмита).

С учетом такого требования выражение (72) переписывается следующим образом:

$$\int \psi^* \hat{F} \varphi dX = \int (\hat{F} \psi)^* \varphi dX. \quad (73)$$

Важным свойством эрмитовых операторов является тот факт, что их собственные значения являются действительными числами. Это крайне важно, так как энергия, импульс, момент импульса, спин частицы должны выражаться действительными числами, будучи собственными значениями соответствующих операторов. Кроме того, фундаментальным свойством линейных самосопряженных операторов является то, что их собственные функции взаимно ортогональны. Это значит, что скалярное произведение двух функций  $f_m(x)$  и  $f_n(x)$  (64) удовлетворяет следующему равенству:

$$(f_m(x), f_n(x)) = 0 \quad \text{при } m \neq n. \quad (74)$$

Если кроме этого выполняется еще и равенство

$$(f_n(x), f_n(x)) = 1, \quad (75)$$

то такие функции называются ортонормированными (условие (75) есть условие нормировки).

Случается так, что одному и тому же собственному значению оператора  $F$  соответствует несколько собственных функций. Такая ситуация называется вырождением. Собственные функции в этом случае, строго говоря, не будут ортогональными.

Исходя из рассмотренных свойств собственных функций линейных самосопряженных операторов можно сформулировать

важнейшее положение квантовой механики: если спектр оператора дискретный, то по его собственным функциям  $\psi_n$  можно разложить любую другую функцию состояния, которая удовлетворяет условиям интегрируемости как сама, так и ее квадрат.

$$\psi(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x) + \dots + c_n\psi_n(x). \quad (76)$$

Выше приводился физический пример молекулы аммиака, когда любое ее произвольное состояние можно разложить по двум базисным  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . Причем

$$c_n = \int \psi_n^* \psi dX. \quad (77)$$

В случае непрерывного спектра суммирование в (76) заменяется интегрированием.

Возьмем частный случай волновой функции  $\psi$  в уравнении (53) как собственной функции оператора полной энергии  $\hat{H}$ , где совокупность собственных значений  $E$  представляет собой энергетический спектр системы. С учетом вышеприведенных рассуждений сформулируем ее основные качества:

- волновая функция  $\psi(\vec{r}, t)$  есть вектор состояния, характеризующий физические параметры системы (энергию, импульс, момент импульса, спин);
- волновая функция должна быть конечной, непрерывной, однозначной;
- квадрат модуля волновой функции  $\psi^* \psi = w$  есть плотность вероятности обнаружить частицу в определенном месте пространства;
- вероятность  $W$  обнаружить частицу в некотором конечном объеме  $v'$  определяется формулой

$$W(v') = \int_{v'} w(\vec{r}) dx dy dz. \quad (78)$$

Если частица находится в пределах объема  $V$ , то интеграл по всему этому объему от  $w$  есть вероятность достоверного события

$$\int_V w(\vec{r}) dx dy dz = 1. \quad (79)$$

Формула (79) представляет собой условие нормировки волновой функции.

Если система в одном состоянии описывается функцией  $\psi_1$ , а в другом состоянии волновой функцией  $\psi_2$ , то физической реальностью обладает также состояние  $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ . Это, как уже отмечалось выше, есть принцип суперпозиции. В классической и квантовой физике принцип суперпозиции имеет одинаковую форму, однако по содержанию здесь имеются весьма существенные различия, на что особенно обращал внимание П. Дирак (подробнее см. список литературы).

Пусть система находится в состоянии, описываемом волновой функцией  $\psi(x)$ , и в результате проведенного измерения механической величины  $F$  было обнаружено значение  $F = F_n$ . Какова вероятность (на единицу объема)  $w(F_n)$  получить это значение? Используя принцип суперпозиции и разлагая  $\psi(x)$  по ортогональным собственным функциям оператора  $F$

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x), \quad (80)$$

получим

$$w(F_n) = |c_n|^2. \quad (81)$$

В случае непрерывного спектра собственных значений суммирование в (80) заменяется интегрированием:

$$\psi(x) = \int c(F)\psi(x, F)dF, \quad (82)$$

но с тем же результатом

$$w(F) = |c(F)|^2. \quad (83)$$

Завершая тему о волновой функции как собственной функции линейного эрмитовского оператора (энергии, импульса, момента импульса, спина, проекции момента импульса), следует отметить ее важную роль в определении средних значений этих величин, которые (средние значения) оцениваются по результатам эксперимента. В классической механике при измерении какой-либо величины мы получаем определенное число, характеризующее ее значение. Если состояние системы не меняется, мы при каждом измерении получаем одно и то же значение. *«В квантовой механике, – пишет П. Дирак, –...Законом природы является то, что если опыт повторять большое число раз, каждый результат будет получен в определенной доле от общего числа случаев, так что имеется определенная вероятность получения данного результата. Эту вероятность и будет вычислять теория».* При этом предполагается, что система все это время находится в заданном состоянии. *«Из этого следует, что динамической переменной в квантовой механике, вообще говоря, нельзя приписать определенного значения, но всегда можно приписать определенную вероятность получения данного результата при измерении. А раз известна вероятность, то можно вычислить среднее значение конкретной физической величины».* Соответствующие расчеты показывают, что если волновая функция нормирована к единице (см. условие (79)), то среднее значение  $\bar{F}$  любой физической величины, которой соответствует оператор  $\hat{F}$ , можно определить по формуле

$$\bar{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi dX, \quad (84)$$

где  $X$  – совокупность переменных. Доказательство этого выражения приведено в цитируемой литературе.

Говоря об операторах, представляющих измеряемые физические величины, необходимо упомянуть об условиях, когда несколько механических величин могут иметь (а могут и не иметь) одновременно определенные значения. Как показывает соответствующий анализ, если операторы  $\hat{F}$  и  $\hat{L}$  имеют общие собственные функции, то коммутатор  $\hat{K}$  таких операторов равен нулю:

$$\hat{K} = \hat{F}\hat{L} - \hat{L}\hat{F} = 0. \quad (85)$$

В этом случае соответствующие динамические переменные имеют одновременно определенные значения. Максимальное число независимых одновременно измеренных наблюдаемых образуют совокупность, называемую полным набором наблюдаемых. Если имеет место противоположная ситуация, т. е.  $\hat{K} \neq 0$ , то динамические переменные, изображаемые операторами, не могут быть одновременно измерены. Так, например, операторы координаты  $x, y, z$  и проекции импульса  $p_x, p_y, p_z$  не коммутируют между собой, и поэтому либо одна из них имеет определенное значение и тогда другая будет неопределенной, либо обе одновременно имеют некоторую степень неопределенности. Эту степень неопределенности можно оценить из так называемого соотношения неопределенностей, установленного В.Гейзенбергом:

$$\sqrt{(\Delta x^2)} \cdot \sqrt{(\Delta p_x^2)} \geq \frac{\hbar}{2}; \quad (86)$$



$$\sqrt{(\Delta y^2)} \cdot \sqrt{(\Delta p_y^2)} \geq \frac{\hbar}{2}; \quad (87)$$

$$\sqrt{(\Delta z^2)} \cdot \sqrt{(\Delta p_z^2)} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (88)$$

Черта означает усреднение по совокупности измерений. Соотношение неопределенностей Гейзенберга определяет верхний предел точности, которого можно достигнуть, одновременно измеряя, например, координату  $x$  и импульс  $p$ . Этот принцип есть следствие использования в квантовой механике «старых» классических понятий.

#### 4. Физико-математический формализм квантовой механики

В основе этого формализма лежит принцип суперпозиции, в рамках которого физическое состояние системы описывается такими математическими объектами, которые складываясь и умножаясь на комплексные числа, дают в итоге величины того же рода. С учетом всего вышерассмотренного материала этот принцип можно раскрыть в виде ряда фундаментальных положений, как формальную схему квантовой механики.

1. Физическое состояние квантовой системы описывается векторами состояний  $\psi(\vec{r}, t)$ , заданными в пространстве Гильберта.

2. Для теоретической оценки значения физических величин в квантовой механике каждой динамической переменной ставится в соответствие линейный эрмитов оператор  $\hat{F}$ , действующий в пространстве векторов состояний, и составляется уравнение на собственные функции и собственные значения этого оператора:

$$\hat{F}\psi = F\psi . \quad (89)$$

3. Совокупность собственных значений оператора  $\hat{F}$ :  $F_1, F_2, F_3, \dots$ , полученных при решении уравнения (89), тождественна совокупности всех возможных результатов измерений механической величины  $F$ , изображенной оператором  $\hat{F}$ .

4. Среднее значение  $\bar{F}$  величины  $F$ , изображаемой оператором  $\hat{F}$ , определяется по формуле

$$\bar{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi dX . \quad (90)$$

При этом вероятность получить при измерении определенное значение  $F$  квантовой системы, находящейся в состоянии  $\psi$ , оценивается как квадрат модуля соответствующей проекции вектора  $\psi$  на орт базиса собственных векторов оператора  $\hat{F}$ .

$$w = |c_n|^2; \quad (91)$$

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi dX.$$

5. Для оператора координаты  $x$  и импульса  $p_x$  существуют перестановочные соотношения:

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar\hat{I}, \quad (92)$$

где  $\hat{I}$  – единичный оператор.

6. Динамика любой квантово-механической системы, находящейся в состоянии, описываемом вектором  $\psi(\vec{r}, t)$ , определяется так называемым динамическим постулатом квантовой механики:

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{F}], \quad (93)$$

где  $[\hat{H}, \hat{F}]$  – квантовые скобки Пуассона:

$$[\hat{H}, \hat{F}] = \frac{i}{\hbar} (\hat{F}\hat{H} - \hat{H}\hat{F}). \quad (94)$$

Введение квантовых скобок Пуассона позволяет описывать динамику квантово-механической системы совершенно аналогично классической физике, только для усредненных по большому числу измерений величин:

$$\bar{F} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{F} \psi(x) dx. \quad (95)$$

Если  $\frac{d\bar{F}}{dt} = 0$ , то данная динамическая переменная является интегралом движения, т. е. сохраняется во времени.

В квантовой механике существует несколько способов введения зависимости от времени. В подходе Шредингера, например, от времени зависят векторы состояний (или волновые функции), операторы при этом считаются стационарными. Динамика векторов состояний в этом случае описывается уравнением Шредингера. Можно построить теорию, в которой со временем меняются операторы, а векторы состояний постоянны. Этот подход предложил В. Гейзенберг. Существует также формализм, в рамках которого и операторы и векторы состояния зависят от времени. Это так называемая картина взаимодействия, предложенная П. Дираком.

Все три подхода физически эквивалентны и в зависимости от определенных условий используются при решении различных задач квантовой физики, когда в качестве базиса выбираются собственные векторы операторов либо координаты, либо импульса, либо полной энергии.

#### 4.1. Операторы квантовой механики

Эволюция любой квантово-механической системы в пространстве и времени определяется координатой  $x$  (в одномерном случае), импульсом  $\vec{p}$ , моментом импульса  $\vec{L}$  и полной энергией  $E$ .

Если вектор состояния  $\psi$  есть функция координаты, то оператор координаты  $\hat{x}$  есть сама переменная  $x$ :

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x). \quad (96)$$

Для такой же волновой функции оператор импульса может быть записан в следующей форме:

$$\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}, \quad (97)$$

Пусть частица массой  $m$  движется вдоль оси  $x$ . Тогда  $\vec{p} = \vec{p}_x$  и уравнение на собственные функции и собственные значения оператора импульса (97) можно записать как

$$\hat{p}_x\psi(x) = p_x\psi(x). \quad (98)$$

Исходя из явного вида оператора импульса, получим

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{i\frac{p_x x}{\hbar}}. \quad (99)$$

Как и следовало ожидать, свободное движение частицы описывается плоской волной де Бройля (99).

Операторы момента импульса  $\hat{L}$  и его проекции определяются по формулам:

$$\hat{L} = [\hat{r} \times \hat{p}]; \quad (100)$$

$$\hat{L}_x = i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right); \quad (101)$$

$$\hat{L}_y = i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right); \quad (102)$$

$$\hat{L}_z = i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right). \quad (103)$$

Для операторов проекций момента импульса  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$ ,  $\hat{L}_z$  имеют место так называемые перестановочные соотношения:

$$\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_z; \quad (104)$$

$$\hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z = i\hbar \hat{L}_y; \quad (105)$$

$$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i\hbar \hat{L}_x. \quad (106)$$

Из соотношений (104)–(106) следует, что операторы проекций момента импульса некоммутативны между собой и поэтому не определяемы одновременно в эксперименте.

Оператор квадрата момента импульса выражается следующей формулой:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left\{ \left( z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \left( x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \right\}. \quad (107)$$

Многие объекты микромира имеют сферическую симметрию и их удобно описывать в сферической системе координат.

$$x = r \sin \Theta \cos \varphi; \quad y = r \sin \Theta \sin \varphi; \quad z = r \cos \Theta, \quad (108)$$

где  $\Theta$  – угол между осью  $oz$  и радиусом-вектором  $\vec{r}$ ;  $\varphi$  – угол, отсчитываемый в плоскости  $XY$  от оси  $ox$ .

В сферической системе координат операторы проекций момента импульса имеют следующий вид:

$$\hat{L}_x = i\hbar \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \Theta} + \operatorname{ctg} \Theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right); \quad (109)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left( \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\Theta} - \operatorname{ctg}\Theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right); \quad (110)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}. \quad (111)$$

Оператор квадрата момента импульса в этой системе запишется как

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin\Theta} \frac{\partial}{\partial\Theta} \left( \sin\Theta \frac{\partial}{\partial\Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\Theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]. \quad (112)$$

Запишем уравнение на собственные функции и собственные значения оператора  $\hat{L}^2$ :

$$\hat{L}^2\psi = L^2\psi. \quad (113)$$

Используя явный вид оператора квадрата момента импульса (112), перепишем (113):

$$\frac{1}{\sin\Theta} \frac{\partial}{\partial\Theta} \left( \sin\Theta \frac{\partial\psi}{\partial\Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\Theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{L^2}{\hbar^2}\psi = 0. \quad (114)$$

С учетом условий конечности, непрерывности и однозначности собственная функция оператора  $\hat{L}^2$  имеет следующий вид:

$$\psi_{\ell m}(\Theta, \varphi) = Y_{\ell m}(\Theta, \varphi) = \left[ \frac{(\ell - |m|)!(2\ell + 1)}{(\ell + |m|)!4\pi} \right]^{1/2} P_{\ell}^{|m|}(\cos\Theta) e^{im\varphi}, \quad (115)$$

где  $Y(\Theta, \varphi)$  – сферические функции;  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$ ;  $\ell = 0, 1, 2, \dots$ ;  $\ell$  – орбитальное квантовое число;  $m$  – магнитное квантовое число (не путать с традиционным обозначением массы  $m$ ; их легко различать по смыслу в формулах).

$$P_{\ell}^{|m|}(\eta) = (1 - \eta^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\eta^{|m|}} P_{\ell}(\eta),$$

где  $P_{\ell}(\eta)$  – полином Лежандра.

$$P_\ell(\eta) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{d\eta^\ell} [(\eta^2 - 1)^\ell]. \quad (116)$$

Сферические функции нормированы к единице на поверхности сферы.

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{\ell m}^* Y_{\ell m} \sin \Theta d\Theta d\varphi = \delta_{\ell' \ell} \delta_{m' m}, \quad (117)$$

где  $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j, \\ 0 & i \neq j. \end{cases}$

Собственные значения оператора квадрата момента импульса при этом определяются из формулы

$$L^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1). \quad (118)$$

Каждому собственному значению (118) принадлежит  $2\ell + 1$  собственных функций, которые различаются числом  $m$ . Это так называемый случай вырождения.

Представим собственную функцию оператора  $\hat{L}^2$  в виде произведения двух функций  $\Theta(\Theta)$  и  $\Phi(\varphi)$ :

$$\psi(\Theta, \varphi) = \Theta(\Theta)\Phi(\varphi). \quad (119)$$

Так как операторы  $\hat{L}^2$  и  $\hat{L}_z$  имеют общие собственные функции, то из уравнения

$$\hat{L}_z \psi = L_z \psi \quad (120)$$

можно получить

$$\Phi(\varphi) = c_1 e^{i \frac{L_z}{\hbar} \varphi}, \quad (121)$$

где  $c_1$  – некоторая постоянная.

Очевидно, что поворот системы на угол  $2\pi$  не должен приводить к изменению ее физического состояния и поэтому

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \quad (122)$$



или

$$e^{i\frac{L_z}{\hbar}\varphi} = e^{i\frac{L_z}{\hbar}(\varphi+2\pi)}. \quad (123)$$

Из последнего уравнения следует, что

$$e^{i\frac{L_z}{\hbar}2\pi} = 1,$$

откуда получим выражение для собственных значений оператора проекции момента импульса

$$L_z = m\hbar, \quad (124)$$

где  $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Таким образом, проекция момента импульса на выбранное направление (в нашем случае на ось  $oz$ ) имеет строго дискретные значения (имеет место пространственное квантование).

В квантовой механике полная энергия принимается как одно целое, не подразделяясь на кинетическую  $T$  и потенциальную  $U$ , что имеет место в классической физике. Как уже указывалось ранее, функция Гамильтона  $H$  (или полная энергия системы) имеет следующий вид:

$$H = T + U. \quad (125)$$

Оператор  $\hat{H}$  строится по известной схеме

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}. \quad (126)$$

Так как потенциальная энергия  $U(\vec{r})$  есть функция координат, то действие соответствующего ей оператора на волновую функцию сводится к простому умножению:

$$\hat{U}\psi(\vec{r}, t) = U\psi(\vec{r}, t). \quad (127)$$

Оператор кинетической энергии  $\hat{T}$  может быть получен исходя из явного вида оператора импульса  $\hat{p}$  (97):

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta,$$

где  $\Delta$  – оператор Лапласа.

Тогда оператор полной энергии (гамильтониан) имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t). \quad (128)$$

Если силы, действующие на квантово-механическую систему зависят от скорости (а такие силы возникают в электромагнитном поле), то оператор полной энергии выражается следующей формулой:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p} + \frac{e}{c} \hat{A} \right)^2 - eV + U, \quad (129)$$

где  $\vec{A}$  и  $V$  – соответственно векторный и скалярный потенциалы электромагнитного поля.

Рассмотрим теперь конкретные случаи решения уравнения на собственные функции и собственные значения оператора полной энергии  $\hat{H}$  с целью определения спектров энергии квантово-механических систем.

## 5. Описание квантово-механических систем с помощью

### уравнения Шредингера

#### 5.1. Свободное движение частицы

Пусть вдоль оси  $x$  движется микрочастица массой  $m$ . Оценим спектр ее энергии  $E$ , для чего запишем уравнение на собственные функции и собственные значения оператора полной энергии  $\hat{H}$ .

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x). \quad (130)$$

Так как в этом случае потенциальная энергия равна нулю, то

$$\hat{H} = \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}.$$

Подставляя выражение для явного вида оператора  $\hat{H}$  в уравнение (130), получим линейное однородное дифференциальное уравнение второго порядка:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0. \quad (131)$$

Его решение будет

$$\psi(x) = A_1 e^{ik_0 x} + A_2 e^{-ik_0 x}, \quad (132)$$

где  $A_1, A_2$  – в общем случае комплексные постоянные;

$$k_0 = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}.$$

Как следует из полученного решения (132), спектр энергии  $E$  в случае свободного движения микрочастицы непрерывен. Само решение  $\psi(x)$  представлено как суперпозиция двух базовых состояний: состояния, в котором частица движется в положительном

направлении оси  $x$ , и состояния, когда движение происходит вдоль отрицательного направления.

Библиотека БГУИР

## 5.2. Движение частицы через потенциальный барьер

Пусть на пути частицы массой  $m$ , имеющей энергию  $E$  и движение которой описывается волновой функцией (132), расположен потенциальный барьер прямоугольной формы шириной  $L$  и высотой  $U_0$

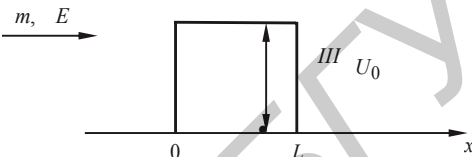


Рис. 5

(рис. 5).

Запишем уравнение на собственные функции и собственные значения оператора полной энергии  $\hat{H}$ :

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad (133)$$

где

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x). \quad (134)$$

Путь движения частицы разобьем на три области (см. рис. 5).

Для каждой из этих областей оператор  $\hat{H}$  имеет следующий вид:

$$(I) \quad \hat{H} = \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad x < 0; \quad (135)$$

$$(II) \quad \hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U_0, \quad 0 \leq x \leq L; \quad (136)$$

$$(III) \quad \hat{H} = \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad x > 0. \quad (137)$$

С учетом явного вида оператора  $\hat{H}$  перепишем уравнение (133):

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi(x) = 0. \quad (138)$$

Решая уравнение (138) с учетом соотношений (135)–(137), получим выражения для волновых функций в каждой из областей:

$$\psi_I(x) = A_1 e^{ik_0 x} + A_2 e^{-ik_0 x}; \quad (139)$$

$$\psi_{II}(x) = A_3 e^{ikx} + A_4 e^{-ikx}; \quad (140)$$

$$\psi_{III}(x) = A_5 e^{ik_0 x} + A_6 e^{-ik_0 x}, \quad (141)$$

где

$$k = \left( \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \right)^{1/2}. \quad (142)$$

«Сшивая» на границах  $x = 0$  и  $x = L$  решения (139)–(141) и полагая  $A_1 = 1$ , а  $A_6 = 0$  (у волны  $\psi_{III}$  нет физической причины для отражения), получим условие для оценки коэффициента прозрачности  $D$ :

$$D = \frac{|A_5|^2}{|A_1|^2}. \quad (143)$$

Коэффициент  $D$  фактически представляет собой вероятность прохождения частицей с энергией  $E$  потенциального барьера высотой  $U_0$ . Если энергия частицы не превышает  $U_0$ , то по законам классической механики  $D = 0$  и частица потенциальный барьер не проходит в принципе. В квантовой механике для этой ситуации величина  $D$  имеет вполне определенное значение:

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}L}. \quad (144)$$

Из выражения (144) следует, что при  $E < U_0$  частица имеет вероятность проникнуть через потенциальный барьер. Такое явление получило название туннельного эффекта.

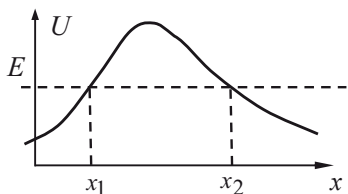


Рис. 6

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x)-E]} dx}, \quad (145)$$

Для потенциального барьера произвольной формы (рис. 6) можно получить следующее выражение для коэффициента прозрачности  $D$ :

где  $x_1$  – координата точки, в которой частица вступает в область действия потенциального поля, где  $E < U$ , а  $x_2$  – координата точки, в которой частица выходит из области действия поля, где  $E < U$ .

### 5.3. Движение атомных частиц внутри потенциального ящика

Пусть частица находится в области, ограниченной потенциальными стенками, сквозь которые она не может проникнуть (рис.7). Условия на границах при этом можно записать в следующем виде:

$$U(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{- внутри ящика,} \\ \infty & \text{- на стенках ящика.} \end{cases}$$

Для нахождения спектра энергии частицы запишем традиционное уравнение на собственные функции и собственные значения оператора полной энергии  $\hat{H}$ :

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (146)$$

где

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right).$$

Решая это уравнение с учетом граничных условий, получим

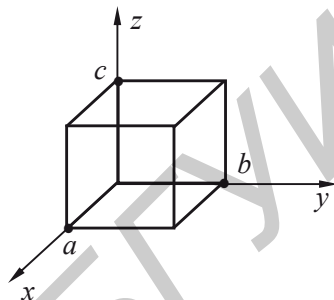


Рис.7



$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a \cdot b \cdot c}} \sin\left[\frac{\pi(n_1+1)}{a}x\right] \sin\left[\frac{\pi(n_2+1)}{b}y\right] \sin\left[\frac{\pi(n_3+1)}{c}z\right], \quad (147)$$

где  $n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \dots$  квантовые числа, обозначающие энергетическое состояние системы при движении вдоль осей  $x, y, z$  соответственно.

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[ \frac{(n_1+1)^2}{a^2} + \frac{(n_2+1)^2}{b^2} + \frac{(n_3+1)^2}{c^2} \right]. \quad (148)$$

Как следует из уравнения (148), у запертой в потенциальном ящике частицы

энергия квантуется. При  $n_1 = n_2 = n_3 = 0$  энергия частицы нулю не равна, а имеет значение  $E_0$ :

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2} \right]. \quad (149)$$

Это энергия основного (наинизшего, «нулевого») энергетического состояния, которая определяется размерами  $a, b, c$  потенциального ящика.

#### 5.4. Движение одномерного гармонического осциллятора

Одномерный гармонический осциллятор можно представить как частицу, совершающую малые колебания вдоль оси  $x$ . Его полную энергию в этом случае можно представить следующим образом:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Kx^2, \quad (150)$$

где  $K = \left( \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right)_{x=0}$ ;  $U$  – потенциальная энергия.

Для гармонических колебаний

$$x(t) = A \cos(\omega_0 t + \alpha), \quad (151)$$

где  $\omega_0 = \sqrt{\frac{K}{m}}$ ;  $A$  – амплитуда колебаний;  $(\omega_0 t + \alpha)$  – фаза колебаний,  $\alpha$  – начальная фаза.

Как и в предыдущих задачах, энергии (150) ставим в соответствие оператор  $\hat{H}$ :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}x^2 \quad (152)$$

и записываем уравнение на собственные функции и собственные значения этого оператора:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x). \quad (153)$$

Учитывая явный вид оператора  $\hat{H}$  (152), получим

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega_0^2}{2}x^2 \right) \psi(x) = 0. \quad (154)$$

Решение этого уравнения имеет следующий вид:

$$\psi_k(\xi) = \frac{e^{-\frac{\xi^2}{2}}}{\sqrt{x_o}} H_k(\xi), \quad (155)$$

где  $\xi = \frac{x}{x_o}$ ;  $x_o = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_o}}$ ;  $H_k(\xi)$  – полином Чебышева – Эрмита  $k$ -го порядка:

$$H_k(\xi) = \frac{(-1)^k}{\sqrt{2^k k! \sqrt{\pi}}} e^{\xi^2} \frac{d^k e^{-\xi^2}}{d\xi^k}. \quad (156)$$

Собственные значения оператора  $\hat{H}$  в этом случае определяются следующей формулой:

$$E_k = \left(k + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_o, \quad (157)$$

где  $k = 0, 1, 2, \dots$  – квантовое число, характеризующее состояние системы. При  $k = 0$

$$E_o = \frac{1}{2} \hbar \omega_o, \quad (158)$$

где  $E_o$  – энергия основного (наинизшего, «нулевого») энергетического состояния.

## 5. 5. Атом водорода

Атом водорода представляет простейшую атомную систему и в истории физики XX века он играл важную роль пробного камня для обоснования атомных теорий. Движение электрона в атоме водорода представляет собой движение в поле центральной силы, которое характеризуется тем, что потенциальная энергия  $U(\vec{r})$  частицы в таком поле зависит лишь от ее расстояния  $r$  до некоторого силового центра.

В случае движения электрона в окрестности атомного ядра гамильтониан системы будет содержать слагаемое с оператором момента количества движения  $\hat{L}$  согласно выражению (100). Так как атом водорода обладает сферической симметрией, то оказывается целесообразным перейти в сферическую систему координат (выражение 108). В такой системе координат выражение для оператора  $\hat{H}$  будет иметь следующий вид:

$$\hat{H} = \hat{T}_r + \frac{\hat{L}^2}{2m_e r^2} + \hat{U}(r). \quad (159)$$

Далее, как и в предыдущих примерах, напишем уравнение на собственные функции и собственные значения оператора (159):

$$\hat{T}_r \psi + \frac{\hat{L}^2}{2m_e r^2} \psi + \hat{U}(\vec{r}) \psi = E \psi. \quad (160)$$

Нам необходимо найти непрерывные, конечные и однозначные решения  $\psi$  уравнения (160) во всей области изменения переменных  $r, \Theta, \varphi$  ( $0 \leq r < \infty$ ,  $0 \leq \Theta \leq \pi$ ,  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ ).

Анализ показывает, что операторы  $\hat{H}$  и  $\hat{L}^2$  коммутируют между собой, т.е.  $\hat{H}\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{H} = 0$ . Как отмечено в разд. 3.2, в таком случае  $\hat{H}$  и  $\hat{L}^2$  имеют общие собственные функции и поэтому можно записать

$$\hat{L}^2\psi = L^2\psi. \quad (161)$$

Тогда уравнение (160) с учетом (118) переписывается в следующем виде:

$$\hat{T}_r\psi + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2m_e r^2}\psi + U(r)\psi = E\psi. \quad (162)$$

Учитывая независимость движения «вдоль» переменных  $r, \Theta, \varphi$ , волновую функцию  $\psi$  можно представить в виде произведения радиальной и угловой частей:

$$\psi(r, \Theta, \varphi) = R(r)Y(\Theta, \varphi). \quad (163)$$

Тогда с учетом этого, уравнение (162) переписывается как

$$\hat{T}_r R + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2m_e r^2}R + U(r)R = ER. \quad (164)$$

Потенциальная энергия электрона в кулоновском поле ядра равна

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{ze^2}{r}, \quad (165)$$

где  $z$  – зарядовое число ядра (для атома водорода  $z = 1$ ).

С учетом всех вышеперечисленных рассуждений и явного вида оператора  $\hat{T}_r$ :

$$\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (166)$$

запишем окончательно уравнение для определения радиальной части  $R(r)$  волновой функции  $\psi(r, \vartheta, \varphi)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) - [E - V(r)] R(r) = 0, \quad (167)$$

где  $V(r) = \frac{e^2}{r} \left[ -\frac{z}{4\pi\epsilon_0} + \frac{a_o(\ell+1)\ell}{2r} \right]$ ;  $V(r)$  – эффективный потенциал

(рис. 8);

$a_o = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$  – первый

боровский радиус для атома

водорода; Определение  $R(r)$

для различных  $(\ell = 0, 1, 2, \dots)$

представляет собой весьма

громоздкую задачу,

имеющую скорее

математический интерес, и

мы его не приводим.

Существенным здесь

является то, что

непрерывные, конечные и

однозначные решения  $R(r)$

существу-

ют лишь при следующих собственных значениях оператора  $\hat{H}$ :

$$E_n = - \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e z^2 e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (168)$$

где  $n = n_r + \ell + 1 = 1, 2, 3, \dots$  – главное квантовое число;  $n_r = 0, 1, 2, \dots$  –

радиальное квантовое число.

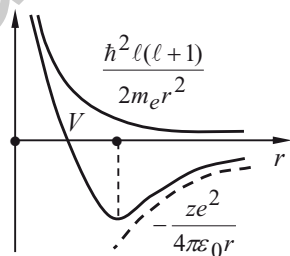


Рис. 8

Анализ показывает, что главное  $n$ , орбитальное и магнитное  $m$  квантовые числа электрона в атоме связаны между собой следующими соотношениями:

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1; \quad (169)$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell. \quad (170)$$

В табл.2 приведены принятые в атомной физике обозначения.

Таблица 2

| Значение $n$          | 1   | 2   | 3   | 4   | 5   | ... |
|-----------------------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| Буквенное обозначение | $K$ | $L$ | $M$ | $N$ | $O$ | ... |
| Значение $\ell$       | 0   | 1   | 2   | 3   | 4   | ... |
| Буквенное обозначение | $s$ | $p$ | $d$ | $f$ | $g$ |     |

При каждом  $n$  имеется  $2\ell + 1$  (см.(170)) волновых функций, различающихся числом  $m$ . Само  $n$ , как следует из (169), пробегает  $n$  значений. В связи с этим общее число функций, принадлежащих квантовому уровню  $E_n$ , будет равно

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2. \quad (171)$$

Как уже отмечалось ранее, такая ситуация называется вырождением и согласно (171) каждый энергетический уровень, характеризуемый главным квантовым числом  $n$ , в атоме водорода  $n^2$  кратно вырожден (с учетом спина  $s$ , о котором речь пойдет ниже, кратность вырождения равна  $2n^2$ ).

Магнитное квантовое число  $m$ , как указывалось выше, определяет величину проекции момента импульса электрона на выделенном направлении.

Совокупность электронов, имеющих одинаковое значение главного квантового числа, образует слой. Слой состоит из оболочек, каждая из которых характеризуется определенным значением  $l$ .

Из закона сохранения энергии следует, что энергия кванта света  $h\nu$ , излученного атомом, равна разности энергий  $E_n - E_{n'}$  электрона, находящегося в состояниях с главными квантовыми числами  $n$  и  $n'$ , соответственно ( $n > n'$ ).

$$h\nu = E_n - E_{n'}. \quad (172)$$

С учетом формулы (168) для  $E_n$  (при  $z=1$  для атома водорода) получим

$$\nu = R \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (173)$$

где  $R = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3}$  – постоянная Ридберга. Формула (173) есть не что иное, как комбинационный принцип (24).

Таким образом, в рамках квантовой механики, решая уравнение Шредингера, оказалось возможным теоретически определить постоянную Ридберга и строго описать без привлечения дополнительных условий линейчатые спектры атома водорода.

Переходы на уровень  $n' = 1$  с уровней  $n = 2, 3, \dots$  образуют серию Лаймана (ультрафиолетовая часть спектра). Переходы на уровень  $n' = 2$  с уровней  $n = 3, 4, \dots$  образуют серию Бальмера (см. табл.1). Переходы на уровень  $n' = 3$  с уровней  $n = 4, 5, \dots$  – образуют серию Ритца – Пашена. Аналогично образуются серии Брэккета, Пфунда и Хэмфри путем переходов с высших уровней на уровни  $n' = 4$  и  $n' = 5$  соответственно. Три квантовых числа  $n, l, m$  полностью определяют волновую функцию  $\psi_{n\ell m}$  (и соответственно физическое состояние



системы) и поэтому образуют полный набор величин, число которых равно числу степеней свободы.

Вероятность обнаружить электрон между  $r$  и  $r + dr$  равна  $4\pi r^2 |\psi|^2 dr$ . Полная вероятность обнаружить электрон в окрестности точки  $r, \Theta, \varphi$ , очевидно, будет определяться формулой

$$dW_{nlm}(r, \Theta, \varphi) = |\psi_{nlm}(r, \Theta, \varphi)|^2 r^2 dr \sin \Theta d\Theta d\varphi. \quad (174)$$

Вероятность  $dW_{lm}(\Theta, \varphi)$  того, что электрон находится в области телесного угла  $d\Omega$  в окрестности луча  $(\Theta, \varphi)$  определяется аналогично:

$$dW_{lm}(\Theta, \varphi) = |Y_{lm}(\Theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (175)$$

Из анализа функции  $Y_{lm}(\Theta, \varphi)$  (115) следует, что вероятность  $dW_{lm}$  не зависит от угла  $\varphi$  и, следовательно, распределение по углам обладает симметрией тела вращения около той оси, на которой фиксирована проекция момента импульса. Как правило, это ось  $z$ .

Движение электрона в атоме водорода создает круговой электрический ток, плотность которого  $j$  в соответствии с (39) можно определить как

$$\vec{j} = \frac{ie\hbar}{2m} (\psi_{nlm} \vec{\nabla} \psi_{nlm}^* - \psi_{nlm}^* \vec{\nabla} \psi_{nlm}). \quad (176)$$

Такой круговой ток, в свою очередь, создает магнитный момент атома  $\vec{\mu}$ . Соответствующие расчеты показывают, что проекция этого момента на выделенное направление (ось  $oz$ ) будет определяться формулой

$$\mu_z = -m\mu_o, \quad (177)$$

где  $\mu_o$  – магнетон Бора;  $m$  – магнитное квантовое число;

$$\mu_e = \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (178)$$

$m_e$  – масса электрона.

Например, для протона в атомном ядре

$$\mu_e^p = \frac{e\hbar}{2m_p} \quad (179)$$

здесь  $m_p$  – масса протона.

Знак (-) в формуле (177) обусловлен отрицательным значением заряда электрона. Как следует из формулы (177), проекция магнитного момента на ось  $oz$  так же, как и проекция момента импульса  $L_z$ , квантуется. Для электрона в атоме

$$\frac{\mu_z}{L_z} = \frac{e}{2m_e} \quad (180)$$

## 6. Собственный механический и магнитный момент электрона

В 1921 г. Штерн и Герлах экспериментально наблюдали расщепление надвое пучка атомов водорода, заведомо находящихся в  $s$ -состоянии, при их прохождении в сильно неоднородном магнитном поле. В этом состоянии механический, а вместе с ним и магнитный моменты, как известно, равны нулю ( $m = 0$ ,  $\ell = 0$ , и как следствие:  $L = 0$ ,  $\mu = 0$ ). Между тем факт отклонения пучка атомов в магнитном поле показывает, что эти атомы тем не менее обладают магнитным моментом. Расщепление же на два пучка свидетельствует о том, что проекция этого магнитного момента  $\mu_z$  на направление магнитного поля может принимать только два значения. Из эксперимента следует, что  $\mu_z = \pm \mu_o$ . Учитывая, что в  $s$ -состоянии  $\ell = 0$ , следует предположить, что этим магнитным моментом обладает электрон.

Так как в классической физике магнитный момент есть результат кругового движения заряда (обладающего механическим моментом), то свойство, аналогичное собственному механическому моменту, было приписано и электрону и названо спином  $\vec{s}$ .

Если проекция  $\vec{s}$  на направление  $oz$  определялась бы целым числом постоянных Планка  $\hbar$  (как это имеет место для орбитального момента), то следовало бы ожидать по крайней мере трех ориентаций спина. Факт же только двух ориентаций спина электрона привел Уленбека и Гаудсмита в 1926 г. к предположению, что проекция  $\vec{s}$  на направление  $z$  измеряется полуцелым числом постоянных Планка и может принимать лишь два значения:

$$s_z = \pm \frac{\hbar}{2}. \quad (181)$$

Так как в квантовой физике для аналитического описания эволюции микросистем каждой величине ставится в соответствие линейный самосопряженный оператор, то необходимо ввести также и оператор спина электрона. Обозначим операторы проекций спина на оси координат через  $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ . Потребуем, чтобы операторы подчинялись тем же правилам перестановки, что и компоненты оператора орбитального момента  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ :

$$\begin{aligned} \hat{s}_x \hat{s}_y - \hat{s}_y \hat{s}_x &= i\hbar \hat{s}_z; \\ \hat{s}_z \hat{s}_x - \hat{s}_x \hat{s}_z &= i\hbar \hat{s}_y; \\ \hat{s}_y \hat{s}_z - \hat{s}_z \hat{s}_y &= i\hbar \hat{s}_x. \end{aligned} \quad (182)$$

В связи с тем, что проекция  $\vec{s}$  на любое направление может принимать два значения  $\pm \frac{\hbar}{2}$ , то операторы  $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$  должны изображаться двухрядными матрицами, так как двухрядная матрица, будучи приведена к диагональному виду, содержит два диагональных члена и, стало быть, имеет только два собственных значения:

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x; \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y; \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z. \quad (183)$$

Из перестановочных соотношений (182) следует, что спиновые матрицы  $\sigma$  имеют следующий вид:

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix},$$

$$\hat{s}^2 \psi = \hbar^2 s(s+1) \psi, \quad s = \frac{1}{2}. \quad (184)$$

Волновая функция, описывающая спиновые состояния, также выражается матрицей:

$$\psi = \begin{vmatrix} \psi_1 & 0 \\ \psi_2 & 0 \end{vmatrix}, \quad (185)$$

где

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \psi_1(x, y, z, s_z = \frac{\hbar}{2}, t); \\ \psi_2 &= \psi_2(x, y, z, s_z = -\frac{\hbar}{2}, t). \end{aligned} \quad (186)$$

## 6.1. Уравнение Паули

При наличии электромагнитного поля оператор Гамильтона имеет вид (129). Исходя из выражений для векторного  $\vec{A}$  и скалярного  $V$  потенциалов, можно определить напряженность электрического  $\vec{E}$  и магнитного  $\vec{H}_m$  полей:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}V - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}; \quad \vec{H} = \text{rot} \vec{A}. \quad (187)$$

Так как электрон обладает магнитным моментом  $\vec{\mu} = -\frac{e}{m_e c} \vec{s}$ , то в магнитном поле напряженности  $\vec{H}$  он приобретает дополнительную потенциальную энергию

$$\Delta U = -\vec{\mu} \vec{H}. \quad (188)$$

Оператор этой энергии  $\Delta U$ , как указывалось в формуле (127), есть само выражение (188):

$$\hat{\Delta U} = \frac{e}{m_e c} (\hat{s} \hat{H}) = \frac{e\hbar}{2m_e c} (\vec{\sigma} \vec{H}) = \frac{e\hbar}{2m_e c} (\sigma_x H_x + \sigma_y H_y + \sigma_z H_z). \quad (189)$$

С учетом этого можно записать:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = \frac{1}{2m_e} \left( \hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi - eV\psi + U\psi + \frac{e\hbar}{2m_e c} (\vec{\sigma} \vec{H})\psi. \quad (190)$$

Это уравнение называется уравнением Паули. Из него следует, что при помещении атома в магнитное поле его энергетические уровни будут расщепляться. Расщепление уровней в магнитном поле есть снятие вырождения. Волновая функция  $\psi$  выражается здесь формулой (185).

## 7. Системы из одинаковых частиц

Одинаковыми называются такие частицы, которые имеют одинаковые массы, заряды, спины и т.д., так что в равных условиях они ведут себя одинаковым образом. Пусть координаты, принадлежащие произвольной  $k$ -й частице, будут  $q_k (q_k = x_k, y_k, z_k)$ . Тогда оператор Гамильтона системы  $N$  таких частиц может быть записан следующим образом:

$$\hat{H}(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \sum_{k=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k^2 + U(q_k, t) \right] + \sum_{k>j=1}^N W(q_k, q_j), \quad (191)$$

где  $W(q_k, q_j)$  – энергия взаимодействия между  $k$ -й и  $j$ -й частицами.

Если в  $\hat{H}$  переставить местами координаты  $k$ -й и  $j$ -й частиц, то очевидно, что гамильтониан не изменится. Это свойство называется инвариантностью гамильтониана относительно перестановки координат любой пары частиц.

Введем оператор перестановки частиц  $\hat{p}_{kj}$ . Под этим оператором будем подразумевать символ, указывающий на то, что координаты  $k$ -й и  $j$ -й частиц должны быть переставлены:

$$\hat{p}_{kj} \psi(\dots, q_k, \dots, q_j, \dots) = \psi(\dots, q_j, \dots, q_k, \dots). \quad (192)$$

Этот оператор является линейным и, кроме того,

$$\hat{p}_{kj} \hat{H} = \hat{H} \hat{p}_{kj}. \quad (193)$$

Отсюда следует, что волновая функция  $\psi' = \hat{p}_{kj} \psi$  также является решением уравнения Шредингера. Оно отличается тем, что  $k$ -я

частица находится в состоянии , ранее занимаемом  $j$ -й частицей, а  $j$ -е состояние занято частицей, находившейся в  $k$ -м состоянии.

Тщательный анализ проблемы описания поведения одинаковых частиц показывает, что состояния системы одинаковых частиц всегда таковы, что можно говорить лишь о состоянии всей совокупности в целом, а не о распределении частиц по состояниям. Из этого вытекает так называемый принцип тождественности: **в совокупности одинаковых частиц реализуются лишь такие состояния, которые не меняются при обмене одинаковых частиц местами.**

Пусть  $\psi(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)$  есть волновая функция, описывающая состояние системы из  $N$  одинаковых частиц. Если поменять местами  $k$ -ю и  $j$ -ю частицы, то получим новое состояние, описываемое функцией  $\psi'$ . Принцип тождественности частиц утверждает, что это новое состояние не отличимо от прежнего, т. е.  $\psi$  и  $\psi'$  описывают одно и то же состояние системы. Волновые функции, описывающие одно и то же физическое состояние системы, могут отличаться друг от друга только постоянным множителем:

$$\psi' = \lambda \psi \quad \text{или} \quad \hat{p}_{kj} \psi = \lambda \psi. \quad (194)$$

Это есть уравнение на собственные функции и собственные значения оператора  $\hat{p}_{kj}$ . Из него легко получить, что собственные функции оператора  $\hat{p}_{kj}$  подразделяются на два класса:

$$I \quad \hat{p}_{kj} \psi = +\psi \quad \Rightarrow \quad \lambda = +1; \quad (195)$$

$$II \quad \hat{p}_{kj} \psi = -\psi \quad \Rightarrow \quad \lambda = -1. \quad (196)$$

Первые функции (195) называются симметричными  $\psi_s$ , а вторые (196) – антисимметричными  $\psi_a$ .



Опытным путем установлено, что весь мир элементарных частиц делится в этом отношении на два класса. При этом наблюдается следующее правило: частицы, обладающие спином, равным целому числу постоянных Планка ( $s = 0, \hbar, \dots$ ), описываются симметричными функциями. Такие частицы называются частицами Бозе, а их совокупности – ансамблями Бозе – Эйнштейна. Частицы, имеющие спин, равный полуцелому числу постоянных Планка ( $s = \frac{1}{2}\hbar, \frac{3}{2}\hbar, \dots$ ), описываются антисимметричными функциями. Такие частицы называются частицами Ферми, а их совокупность – ансамблями Ферми – Дирака.

К ферми-частицам относятся кварки, электроны, протоны, нейтроны, гипероны,  $\mu$ -мезоны, нейтрино и их античастицы. Спин 0 имеют  $\pi$ -мезоны,  $K$ -мезоны, глюоны. Спин  $\hbar$  имеет фотон.

Основной особенностью частиц типа Ферми является то, что они подчиняются принципу Паули. Для его определения учтем, что Ферми-частица, например, электрон, обладает четырьмя степенями свободы, три из которых относятся к движению центра тяжести этой частицы, а четвертая есть ее спин. Эти четыре степени свободы можно охарактеризовать величинами  $F_1, F_2, F_3$  и  $S$ , одновременно измеримыми в эксперименте (например:  $F_1$  – полная энергия движения,  $F_2$  – момент импульса,  $F_3$  – проекция момента импульса,  $S$  – спин). В этой связи принцип Паули в общем виде может быть сформулирован следующим образом: в системе электронов в каждый момент времени при измерении любых четырех величин  $F_1, F_2, F_3, S$ , характеризующих состояние отдельного электрона, **каждое значение**

четверки величин  $F_1, F_2, F_3, S$  может быть получено **только для**  
**одного электрона** системы.

Библиотека БГУИР

## 8. Атом гелия

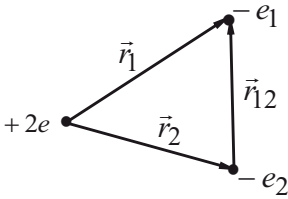


Рис. 9

Рассмотрим атом гелия, имеющий два электрона  $e_1$  и  $e_2$ , вращающиеся вокруг ядра с зарядом  $2e$  (рис. 9). Обозначим координаты электронов через  $x_1, y_1, z_1(\vec{r}_1)$  и  $x_2, y_2, z_2(\vec{r}_2)$ , а их спины через  $s_1$  и  $s_2$ . Оператор потенциальной энергии кулоновских взаимодействий будет равен

$$U = -\frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}. \quad (197)$$

Оператор энергии магнитных взаимодействий, связанный со спинами, положением и скоростями электронов, очень мал и учитывать его не будем.

Тогда оператор Гамильтона для атома гелия можно записать в следующем виде:

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}. \quad (198)$$

Полная волновая функция двух электронов должна содержать координатную  $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  и спиновую  $s(s_{z1}, s_{z2})$  части:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_{z1}, s_{z2}) = \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) s(s_{z1}, s_{z2}). \quad (199)$$

Так как электроны подчиняются принципу Паули, то волновая функция должна быть антисимметричной (см. раздел 8). В этом случае из (199) следует, что возможны два вида антисимметричных волновых функций:

$$\psi_I = \Phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) s_a(s_{z1}, s_{z2}); \quad (200)$$

$$\psi_{II} = \Phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) s_s(s_{z1}, s_{z2}), \quad (201)$$

где значки  $s$  и  $a$  обозначают симметричные и соответственно антисимметричные функции.

В общем виде спиновую функцию  $s$  двух электронов можно записать в виде

$$s(s_{z1}, s_{z2}) = s_{\alpha_1}(s_{z1}) s_{\alpha_2}(s_{z2}), \quad (202)$$

где  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  указывают направление спина электрона по оси  $z$  ( $\alpha_1, \alpha_2 = \pm \frac{1}{2}$ ).

Пусть спины электронов противоположны друг другу. Тогда волновая функция (202) имеет вид

$$s'(s_{z1}, s_{z2}) = s_{+\frac{1}{2}}(s_{z1}) s_{-\frac{1}{2}}(s_{z2}). \quad (203)$$

Возможна и обратная ориентация спинов:

$$s''(s_{z1}, s_{z2}) = s_{-\frac{1}{2}}(s_{z1}) s_{+\frac{1}{2}}(s_{z2}). \quad (204)$$

Оба эти состояния отвечают суммарному спину по оси  $z$ , равному нулю, и оба принадлежат одной и той же энергии  $E$ . Поэтому этой же энергии может принадлежать и любая суперпозиция этих состояний. Среди них единственная, описываемая антисимметричной функцией  $s_a$ , имеет вид

$$s_a(s_{z1}, s_{z2}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ s_{+\frac{1}{2}}(s_{z1}) s_{-\frac{1}{2}}(s_{z2}) - s_{-\frac{1}{2}}(s_{z1}) s_{+\frac{1}{2}}(s_{z2}) \right]. \quad (205)$$

Множитель  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  введен из условия нормировки  $s_a$  к единице.

Для случая параллельных спинов антисимметричные состояния невозможны, и в этом случае существуют следующие варианты:

$$s'_s(s_{z1}, s_{z2}) = s_{+\frac{1}{2}}(s_{z1}) s_{+\frac{1}{2}}(s_{z2}); \quad (206)$$

$$s''_s(s_{z1}, s_{z2}) = s_{-\frac{1}{2}}(s_{z1}) s_{-\frac{1}{2}}(s_{z2}). \quad (207)$$

По спину электронов эти состояния очевидно симметричны. Кроме того, из (203) и (204) можно образовать еще одну симметричную по спинам функцию:

$$s'''_s(s_{z1}, s_{z2}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ s_{+\frac{1}{2}}(s_{z1}) s_{-\frac{1}{2}}(s_{z2}) + s_{-\frac{1}{2}}(s_{z1}) s_{+\frac{1}{2}}(s_{z2}) \right]. \quad (208)$$

Таким образом, оказываются возможными три симметричные по спину функции. В каждом из этих состояний суммарный спин равен единице, только в случае (206) он направлен в положительном направлении оси  $z$ , в случае (207) – отрицательном, а в случае (208) – направлен перпендикулярно оси  $z$ .

Согласно же (200) и (201), состояния, симметричные в координатах центров тяжести электронов  $\Phi_s$ , есть состояния с суммарным спином электронов, равным нулю. Состояния, антисимметричные в координатах центров тяжести электронов  $\Phi_a$ , есть состояния с параллельными спинами электронов, когда суммарный спин равен единице. Таким образом, существует два сорта гелия – с параллельными и антипараллельными спинами. Первый сорт гелия называют ортогелием, а второй – парагелием. Из условия

минимума энергии атома гелия следует, что гелий в нормальном состоянии есть парагелий. Для этого состояния энергия атома гелия будет равна

$$E = 2E_1 + K + A, \quad (209)$$

где  $E_1$  – энергия первого уровня электрона;

$$K = \int \frac{\rho_m(\vec{r}_1)\rho_{mm}(\vec{r}_2)}{r_{12}} d\nu_1 d\nu_2, \quad (210)$$

$\rho_m(\vec{r}_1) = -e|\psi_n(\vec{r}_1)|^2$  – плотность электрического заряда (в точке  $\vec{r}_1$ ), создаваемого электроном, находящимся в состоянии  $\psi_n(\vec{r})$ .

$\rho_{mm}(\vec{r}_2) = -e|\psi_m(\vec{r}_2)|^2$  – плотность электрического заряда (в точке  $\vec{r}_2$ ), создаваемого электроном, находящимся в состоянии  $\psi_m(\vec{r}_2)$ . Величина

$K$  есть не что иное, как кулоновская энергия взаимодействия двух зарядов, один из которых распределен в пространстве с плотностью  $\rho_m$ , а второй – с плотностью  $\rho_{mm}$ . Это энергия кулоновского взаимодействия двух электронов, заряды которых «размазаны» в пространстве.

Величина  $A$  имеет гораздо более сложный смысл:

$$A = \int \frac{\rho_{mn}(\vec{r}_1)\rho_{mn}^*(\vec{r}_2)}{r_{12}} d\nu_1 d\nu_2, \quad (211)$$

где  $\rho_{mn}(\vec{r}_1) = -e\psi_m^*(\vec{r}_1)\psi_n(\vec{r}_1)$ ;  $\rho_{mn}^*(\vec{r}_2) = -e\psi_m(\vec{r}_2)\psi_n^*(\vec{r}_2)$ . Это плотности зарядов, которые обусловлены тем, что каждый из электронов может находиться частью в состоянии  $\psi_n(\vec{r})$ , частью в состоянии  $\psi_m(\vec{r})$ .

$\rho_{mn}(\vec{r}_1)$  и  $\rho_{mn}^*(\vec{r}_2)$  называются обменными плотностями, а энергию  $A$  называют обменной энергией.

Если предположить, что между электронами имеет место не электрическое, а какое-либо другое взаимодействие, то все равно имеет место энергетическая добавка  $A$ , связанная с одинаковостью взаимодействующих частиц.

# СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

## 1. Основные идеи теории

Термодинамика – это макроскопическая теория тепла, имеющая феноменологическую основу. Физическая система в термодинамике описывается определенной совокупностью макроскопически измеряемых параметров, число которых ограничено. Связь между этими параметрами и общие закономерности, которым они подчиняются, выводятся из аксиом, рассматриваемых как факты опыта.

В отличие от термодинамики статистическая физика является атомистической теорией тепловой формы движения материи, в основу которой кладется определенная модель, отражающая специфику конкретной формы вещества. При этом делаются некоторые статистические предположения об априорных вероятностях тех или иных микроскопических состояний системы.

Все изложение современной статистической физики строится на основе метода Гиббса, основанного на формализме статистических ансамблей и вероятностей их распределения.

Одной из задач статистической физики является вычисление на основе молекулярных представлений средних значений макроскопических характеристик системы: давления  $P$ , температуры  $T$ , теплоемкости  $C$ , энергии  $E$ , восприимчивости  $\chi$  и др. Для этого, в частности, используется метод термодинамических потенциалов, который позволяет установить связь между термодинамическими переменными системы с помощью введения ограниченного числа



некоторых величин – термодинамических потенциалов и действий дифференцирования над ними. Основными термодинамическими потенциалами являются:

1. Внутренняя энергия  $E(S, V)$  как функция энтропии и объема:

$$dE = TdS - PdV; \quad (212)$$

$$T = \left( \frac{\partial E}{\partial S} \right)_V; \quad P = - \left( \frac{\partial E}{\partial V} \right)_S; \quad \frac{\partial T}{\partial V} = - \frac{\partial P}{\partial S}.$$

2. Свободная энергия  $F(T, V)$  как функция температуры и объема:

$$dF = -SdT - PdV; \quad (213)$$

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V; \quad P = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T; \quad \frac{dS}{dV} = \frac{\partial P}{\partial T}.$$

3. Термодинамический потенциал  $G(T, P)$  (потенциал Гиббса) как функция температуры и давления:

$$dG = -SdT + VdP; \quad (214)$$

$$S = - \left( \frac{\partial G}{\partial T} \right)_P; \quad V = \left( \frac{\partial G}{\partial P} \right)_T; \quad \frac{dS}{dP} = \frac{\partial V}{\partial T}.$$

4. Энтальпия (тепловая функция)  $H(S, P)$  как функция энтропии и давления:

$$dH = TdS + VdP; \quad (215)$$

$$T = \left( \frac{\partial H}{\partial S} \right)_P; \quad V = \left( \frac{\partial H}{\partial P} \right)_S; \quad \frac{dT}{dP} = \frac{\partial V}{\partial S}.$$

В некоторых специальных случаях возможно конструирование и других термодинамических потенциалов.

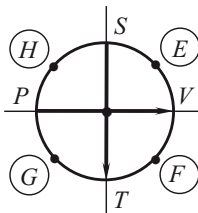


Рис.10

Все термодинамические потенциалы ( $E, F, G, H$ ) представляют собой энергию системы, выраженную

через один интенсивный ( $T$  или  $P$ ) и один экстенсивный ( $V$  или  $S$ ) параметры состояния. Для их запоминания (что представляет собой определенную трудность для студентов) можно предложить следующую наглядную диаграмму (рис. 10). Жирными стрелками указано движение поез-

да из Парижа ( $P$ ) во Владивосток ( $V$ ) (вектор  $\overline{PV}$ ), по местности где солнце ( $S$ ) светит на траву ( $T$ ) (вектор  $\overline{ST}$ ). Термодинамические потенциалы расположены между переменными  $S, V, T, P, S$  в порядке следования букв в латинском алфавите ( $E, F, G, H$ ) по часовой стрелке.

Рассмотрим, как работает эта диаграмма. Для примера запишем выражение для  $dG$  (см. формулу (214)). Потенциал  $G$  находится между  $P$  и  $T$ . Это его переменные и они войдут в формулу в виде дифференциалов  $dP$  и  $dT$ .

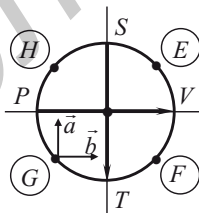


Рис.11

Постоянными множителями к дифференциалам  $dP$  и  $dT$  будут находящиеся на другом конце данных векторов ( $\overline{PV}$  и  $\overline{ST}$ ) величины  $V$  и  $S$  соответственно. В точке  $G$  построим векторы  $\vec{a}$  и  $\vec{b}$ , параллельные  $\overline{ST}$  и  $\overline{PV}$  ( $\vec{a} \parallel \overline{ST}$ ,  $\vec{b} \parallel \overline{PV}$ ) (рис. 11). Так как вектор  $\vec{b}$

совпадает по направлению с  $\overline{PV}$ , то соответствующее слагаемое в выражении для  $dG$  будет с положительным знаком, т. е.:  $VdP$ .

Вектор  $\vec{a}$  направлен в противо-

положную сторону по отношению к вектору  $\overline{ST}$ , следовательно, слагаемое  $SdT$  будет с отрицательным знаком. В итоге получим

$$dG = VdP - SdT. \quad (216)$$

По такому алгоритму получают все остальные дифференциалы термодинамических потенциалов.

Выразим теперь один термодинамический потенциал через другой. Для примера – потенциал  $G$  через  $E$ :

$$G = E + (?). \quad (217)$$

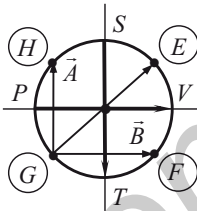


Рис.12

Как получить выражение в скобках формулы (217)? Для этого на диаграмме строим вектор  $\overline{GE}$  (рис. 12) и раскладываем его на составляющие векторы  $\vec{A}$  и  $\vec{B}$ , параллельные векторам  $\overline{ST}$  и  $\overline{PV}$  соответственно. Дополнительными слагаемыми в (217) будут теперь произведения  $PV$  и  $ST$ . Осталось определиться с их знаками. Так как

$\vec{B}$  совпадает по направлению с  $\overline{PV}$ , то слагаемое  $PV$  входит в выражение для  $G$  (217) с положительным знаком. Вектор  $\vec{A}$

направлен противоположно вектору  $\overline{ST}$ , следовательно, слагаемое  $ST$  входит в формулу (217) с отрицательным знаком. В итоге формулу (217) перепишем в явном виде:

$$G = E + PV - ST . \quad (218)$$

По такой схеме можно выразить термодинамические потенциалы друг через друга.

Примечание: когда мы говорили о построении векторов  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{A}, \vec{B}$ , параллельных  $\overline{ST}$  и  $\overline{PV}$ , речь шла лишь о параллельности линий, вдоль которых были построены соответствующие векторы. Взаимоотношение же направлений самих векторов следует оговорить специально.

В качестве примера рассмотрим алгоритм получения информации о термодинамическом состоянии системы исходя из ее свободной энергии  $F$  (не смешивать с обозначением операторов  $\hat{F}$  и их собственных значений  $F$  в разделе «Квантовая механика»).

Среднюю энергию системы  $\overline{E}$  можно определить по формуле

$$\overline{E} = F - T \frac{\partial F}{\partial T}, \quad (219)$$

энтропия системы  $S$  определяется как

$$S = - \frac{\partial F}{\partial T}, \quad (220)$$

давление  $P$  можно оценить из соотношения

$$P = - \frac{\partial F}{\partial V}, \quad (221)$$

теплоемкость  $C_V$  при постоянном объеме равна

$$C_V = \frac{\partial \overline{E}}{\partial T}. \quad (222)$$

Для магнитных систем намагниченность  $\mathfrak{Z}$  можно определить из выражения

$$\mathfrak{Z} = -\left(\frac{\partial F}{\partial H}\right), \quad (223)$$

где  $H$  – напряженность магнитного поля.

Восприимчивость  $\chi$  такой системы выражается формулой

$$\chi = -\left(\frac{\partial^2 F}{\partial H^2}\right). \quad (224)$$

Химический потенциал  $\mu_s$  определяется дифференцированием  $F$  по числу частиц  $N$ :

$$\mu_s = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right). \quad (225)$$

Определение же  $F$  является прямой задачей статистической физики, которая, как указывалось выше, учитывает микроструктуру вещества. В основу статистической теории У. Гиббс положил метод статистических ансамблей и каноническое распределение, которое определяет вероятность  $w$  (а точнее, плотность вероятности) состояния системы, обладающей  $r$  степенями свободы ( $r = mN$ ,  $m$  – число степеней свободы одной частицы,  $N$  – число частиц). Исходным для всей статистической физики является понятие о статистическом ансамбле. Выделение статистического ансамбля в классической физике в первую очередь связано с заданием типа измерения, которое должно быть проведено над рядом одинаковых систем. Если системы находятся в различных с точки зрения механики состояниях, то результаты измерений также будут различны. Вся **совокупность результатов измерений** и представляет собой статистический ансамбль. Однако определение статистического ансамбля целесообразно дать в рамках наиболее общего, квантового подхода. *«Вместо временного усреднения в рамках одной системы Больцман и Гиббс предложили рассматривать совокупность*

большого числа соответствующим образом разупорядоченных одинаковых систем. Средние значения в определенный момент времени определяются по этой совокупности систем, а сама совокупность называется **ансамблем системы**. Такое среднее называется **средним по ансамблю**. Ансамбль представляет собой мысленную конструкцию, характеризующую в один единственный момент времени свойства реальной системы, которые проявляются в ней с течением времени. Ансамбль систем состоит из очень большого числа одинаковым образом «устроенных» систем. Каждая система из ансамбля является точной копией реальной системы в одном из ее допустимых квантовых состояний» (Ч.Киттель).

Так как любое вещество – это совокупность связанных частиц, или охваченное взаимодействием единое целое, то в описательном отношении такую систему надо рассматривать также как единое целое, то есть все сразу, а не как совокупность отдельных составляющих. В обычном трехмерном пространстве ввести такой формализм невозможно и поэтому вводится так называемое фазовое пространство, в котором отражается состояние (положение и импульс каждой из  $N$  частиц) **всей** системы сразу в произвольный момент времени. Исходя из плотности вероятности  $w$  по известной процедуре, можно определить средние значения физических величин, характеризующих систему. Сразу следует подчеркнуть аналогию с квантовой механикой, где плотность вероятности  $w = \psi^* \psi$  также играет фундаментальную роль (хотя природа вероятностного поведения в том и другом случаях качественно различна).

Фазовое пространство ( $\Gamma$ -пространство) – это абстрактное пространство, по ортогональным осям которого отложено  $r$

обобщенных координат  $q_j$  и  $r$  сопряженных этим координатам импульсов  $p_j$ . Размерность фазового пространства, таким образом, равна  $2r$ . Механическое состояние системы изображается в фазовом пространстве точкой (так называемая изображающая или фазовая точка), а ее развитие описывается как движение изображающей точки в  $2r$ -мерном пространстве по одномерной кривой. Эта кривая представляет собой фазовую траекторию. Размерность  $\Gamma$  пространства для системы с  $r$  степенями свободы равна  $(q \times p)^r = (\text{координата} \times \text{импульс})^r = (\text{действие})^r$ . Так как квант действия равен постоянной Планка  $h = 2\pi\hbar$ , то фазовое пространство является дискретным, состоящим из «клеток», число которых равно  $\frac{\Gamma}{(2\pi\hbar)^r}$ .

Числу  $N'$  тождественных систем в фазовом пространстве соответствует  $N'$  изображающих точек. В этой связи можно ввести понятие о плотности распределения  $w$ :

$$w(p, q, t) = \frac{\Delta N'}{N' \Delta \Gamma}, \quad (226)$$

где  $\Delta N'$  – число изображающих точек в элементе фазового пространства  $\Delta \Gamma$ .

Функция  $w(p, q, t)$  нормирована условием

$$\int w(p, q, t) d\Gamma = 1. \quad (227)$$

Если между частицами системы взаимодействие практически отсутствует, то для описания такой системы оказывается удобным ввести 6-мерное  $\mu$ -пространство  $(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$ , в котором система из  $N$  частиц описывается движением  $N$  изображающих точек.

Разъясним вышесказанное на примере системы из  $N$  частиц в  $\mu$ -пространстве. Элемент объема в таком пространстве  $d\Gamma$  имеет следующий вид:

$$d\Gamma = dx dy dz dp_x dp_y dp_z. \quad (228)$$

Число частиц  $dN$ , находящихся в таком объеме, очевидно, должно быть пропорционально  $d\Gamma$  (для очень малых  $d\Gamma$ ). Кроме того, в самом общем случае  $dN$  будет также зависеть от точки фазового пространства. Такую зависимость определим функцией  $R(\vec{r}, \vec{p}, t)$ . Тогда можно записать:

$$dN = R(\vec{r}, \vec{p}, t) d\Gamma. \quad (229)$$

Вероятность  $dW$  одной частице находиться в элементе объема  $d\Gamma$  можно определить как  $\frac{dN}{N}$ :

$$dW = \frac{R(\vec{r}, \vec{p}, t)}{N} d\Gamma. \quad (230)$$

Обозначим величину  $\frac{R(\vec{r}, \vec{p}, t)}{N}$  через  $w(\vec{r}, \vec{p}, t)$ , которая будет характеризовать вероятность нахождения одной частицы в единичном объеме фазового пространства. С помощью функции  $w(\vec{r}, \vec{p}, t)$ , как уже указывалось выше, можно оценить среднее значение любой физической величины, характеризующей систему частиц. Для примера определим среднюю энергию частицы  $\bar{E}$ . Пусть в элементе объема  $d\Gamma$  находится  $dN$  частиц. Очевидно, что их суммарная энергия будет равна  $E dN$ . Полная энергия  $E_{i\ddot{e}i}$  всей системы частиц будет равна  $\int E dN$ . Тогда средняя энергия  $\bar{E}$  одной частицы определяется как  $E_{i\ddot{e}i} / N$ . Таким образом можно записать



$$\bar{E} = E_{\text{ср}} / N = \int E \frac{dN}{N} = \int E w(\vec{r}, \vec{p}, t) d\Gamma. \quad (231)$$

Подставляя в (231) вместо  $E$  любую другую физическую характеристику  $A$ , можно определить ее среднее по ансамблю значение  $\bar{A}$ .

На протяжении всего времени развития статистической теории, начиная с Гиббса, были получены конкретные выражения для  $w$ , описывающие состояние различных физических систем.

## 2. Функции распределения в статистической физике

### 2.1. Микроканоническое распределение

Для адиабатической системы, находящейся в состоянии термодинамического равновесия, функция  $w(p, q)$  вводится постулативно на основе совпадения всех результатов вычислений с данными эксперимента:

$$w(p, q) = A\delta[E - H(p, q)], \quad (232)$$

где  $E$  – энергия системы;  $H(p, q)$  – функция Гамильтона;  $A$  – нормировочный множитель;  $\delta(x)$  – дельта-функция Дирака, обладающая следующими свойствами:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0 \text{ и } x > 0 \\ \infty & \text{при } x = 0 \end{cases}. \quad (233)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1; \quad (234)$$

Для произвольной функции  $f(x)$  справедливы следующие равенства:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0); \quad (235)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) f(x) dx = f(a); \quad (236)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x), \quad a \neq 0; \quad (237)$$

$$\delta[f(x)] = \frac{1}{|f'(0)|} \delta(x). \quad (238)$$

Формула (232) получила название микроканонического распределения, которое описывает системы с постоянным, строго фиксированным значением энергии  $E$ . Практическое использование этого распределения приводит к значительным трудностям,

связанным при определении средних значений физических величин с необходимостью интегрирования по многомерной поверхности  $H(p, q) = E$ .

## 2.2. Каноническое распределение

Проблема с использованием распределения (232) снимается введением канонического распределения, когда энергия  $E$  не имеет строго определенного значения как в предыдущем случае, а постоянной является температура (изотермические системы).

$$w(p, q) = B e^{-\frac{F-H(p, q)}{k_A T}}, \quad (238)$$

где  $F$  – свободная энергия системы:

$$F = -k_A T \ln Z, \quad (239)$$

здесь  $Z$  – статистический интеграл, или интеграл состояний, получающийся из условия нормировки для (238):

$$Z = B \int e^{-\frac{H(p, q)}{k_A T}} d\Gamma. \quad (240)$$

$B$  – нормировочный множитель.

Определив с помощью (240) свободную энергию (239) по формулам (219) – (225), можно оценить физические характеристики системы.

### 2.3. Большое каноническое распределение

Для систем с переменным числом частиц вводится так называемое большое каноническое распределение. Пусть  $N$  частиц системы распределены по  $k$  энергетическим уровням. При этом предполагается, что число частиц на каждом уровне может изменяться. Тогда статистическое распределение для этой системы будет иметь вид

$$w_{kN} = Ce^{\frac{\Omega + \mu_s N - E_{kN}}{k_A T}}, \quad (241)$$

где  $\Omega$  – термодинамический потенциал, зависящий от  $T, V$  и  $\mu_s$ ,  $C$  – нормировочный множитель.

Из условия нормировки (227) для (241) получим:

$$\Omega = -k_A T \ln \sum_N \left[ Ce^{\frac{\mu_s N}{k_A T}} \sum_k e^{-\frac{E_{kN}}{k_A T}} \right]; \quad (242)$$

$$N = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu_s} \right)_{T, V}. \quad (243)$$

Выражение (241) описывает квантовую статистику. В классическом случае:

$$w_N = \frac{1}{N! (2\pi \hbar)^r} e^{\frac{\Omega + \mu_s N - E_N(p, q)}{k_A T}}, \quad (244)$$

где

$$\Omega = -k_A T \ln \left[ \sum_N \frac{1}{N! (2\pi \hbar)^r} e^{\frac{\mu_s N}{k_A T}} \cdot \int e^{-\frac{E_N(p, q)}{k_A T}} d\Gamma_N \right]. \quad (245)$$

Здесь учтено, что каждому  $N$  сопоставляется свое фазовое пространство.

Для определения средних значений физических величин, характеризующих систему, принципиально применимы все три распределения, однако наиболее удобным с математической точки зрения является большое каноническое распределение Гиббса (241), (244). Нормировочные множители  $A, B$  и  $C$  учитывают также тождественность частиц, то есть они обратно пропорциональны  $N!$

## 2.4. Статистические распределения Ферми и Бозе

При описании квантовых систем используется статистика, основанная на квантовой модели вещества. Так как в замкнутых квантовых системах энергетический спектр дискретен, то статистический интеграл (240) заменяется статистической суммой.

Квантовое каноническое распределение в этом случае может быть записано в следующем виде:

$$W_k = e^{\frac{F-E_k}{k_A T}} g_k, \quad (246)$$

где  $g_k$  – кратность вырождения,  $F = -k_A T \ln Z$ , здесь  $Z$  – статистическая сумма

$$Z = \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{E_k}{k_A T}}, \quad (247)$$

Однако учет одной лишь дискретности энергетического спектра недостаточен для объяснения специфики поведения квантовых систем. Для систем тождественных частиц необходимо учитывать также их принципиальную неразличимость. В этом случае статистика будет различной в зависимости от того, какого рода волновыми функциями описываются частицы рассматриваемой системы.

Как известно (см. разд. 8), волновые функции должны быть либо симметричными, либо антисимметричными по отношению к перестановке любой пары частиц. Симметричные волновые функции имеют место для частиц с целым, а антисимметричные – для частиц с полуцелым спином. Пусть  $n_k$  – число частиц, находящихся в  $k$ -м квантовом состоянии (энергия  $k$ -го уровня  $E_k$  равна  $n_k \varepsilon_k$ ). Величины  $n_k$  называются числами заполнения  $k$ -х квантовых состояний.

Из аддитивности потенциала  $\Omega$  (242) ( $\Omega = \sum_k \Omega_k$ ) для  $\Omega_k$  можно записать

$$\Omega_k = -k_A T \ln \sum_{n_k} \left[ e^{\frac{(\mu_s - \varepsilon_k)}{k_A T}} \right]^{n_k}. \quad (248)$$

Для Ферми-частиц (спин  $s = \frac{1}{2}\hbar, \frac{3}{2}\hbar, \dots$ ), согласно принципу Паули, число заполнения  $n_k$  может принимать значения либо 0, либо 1. С учетом этого

$$\Omega_k = -k_A T \ln(1 + e^{\frac{(\mu_s - \varepsilon_k)}{k_A T}}). \quad (249)$$

Среднее число частиц на  $k$ -м квантовом уровне можно определить из соотношения (243):

$$\bar{n}_k = -\frac{\partial \Omega_k}{\partial \mu_s}. \quad (250)$$

Подставляя (249) в (250), получим

$$\bar{n}_k = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k - \mu_s}{k_A T}} + 1}. \quad (251)$$

Это так называемое распределение Ферми, которое нормировано условием:

$$\sum_k \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k - \mu_s}{k_A T}} + 1} = N. \quad (252)$$

Для Бозе-частиц (спин  $s = 0, \hbar, \dots$ ) числа заполнения квантовых состояний ничем не ограничены ( $0 \leq n_k \leq \infty$ ). Тогда из выражений (248) и (250) получим

$$\bar{n}_k = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_k - \mu_s}{k_A T}} - 1}. \quad (253)$$



Формула (253) представляет статистику Бозе и называется распределением Бозе. Оно подчиняется такому же условию нормировки (252).

Величина  $\bar{n}_k$  в формуле (251) есть не что иное, как вероятность  $W_k$  заполнения Ферми-частицей  $k$ -го энергетического уровня. Для Бозе-частиц  $\bar{n}_k$  (формула (253)) не совпадает с вероятностью того, что какой-то уровень заселен.

## 2.5. Распределение Максвелла–Больцмана

Это распределение определяет вероятность  $w d\Gamma$  того, что импульсы и координаты всех  $N$  не взаимодействующих между собой частиц системы (идеальный газ) лежат внутри заданного элемента  $\delta$

$N$ -мерного фазового пространства  $d\Gamma = dq \cdot dp$ , (где

$$dq = dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2 \dots dx_N dy_N dz_N;$$

$dp_{x1} dp_{y1} dp_{z1} dp_{x2} dp_{y2} dp_{z2} \dots dp_{xN} dp_{yN} dp_{zN}$ ). Функция Гамильтона  $H(p, q)$

для такого идеального газа, состоящего из молекул одного сорта массы  $m$ , может быть записана следующим образом:

$$H(p, q) = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2m} (p_{x_i}^2 + p_{y_i}^2 + p_{z_i}^2) + U(q_i) \right]. \quad (254)$$

Подставляя это выражение в каноническое распределение Гиббса, получим следующую формулу:

$$f(\vec{p}, \vec{r}) = \left( \frac{1}{2\pi m k_A T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m k_A T}} \cdot \tilde{N}_A \cdot e^{-\frac{U(x, y, z)}{k_A T}}. \quad (255)$$

Формула (255) представляет собой известное распределение Максвелла–Больцмана, которое можно представить как произведение двух распределений  $f_{\vec{p}}$  и  $f_{\vec{r}}$ :

$$f_{\vec{p}} = \left( \frac{1}{2\pi m k_A T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{p^2}{2m k_A T}}; \quad (256)$$

$$f_{\vec{r}} = \tilde{N}_A \cdot e^{-\frac{U(x, y, z)}{k_A T}}, \quad (257)$$

где  $f_{\vec{p}}$  – распределение Максвелла (1860 г.);  $f_{\vec{r}}$  – распределение Больцмана (1868 г.).

Формула (256) позволяет оценить вероятность определенных значений импульса, а (257) – вероятность определенных значений координат.

Для проекций скоростей можно записать:

$$f_{v_x, v_y, v_z} = \left( \frac{m}{2\pi k_A T} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2k_A T}}. \quad (258)$$

Число молекул  $dN$  в системе, скорости которых лежат в интервале значений от  $v$  до  $v + dv$ , можно определить по формуле

$$dN = 4\pi N \left( \frac{m}{2\pi k_A T} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{mv^2}{2k_A T}} \cdot v^2 dv. \quad (259)$$

Это распределение Максвелла для модуля скорости. Соответствующая вероятность  $dW$  равна

$$dW = \frac{dN}{N}. \quad (260)$$

### 3. Использование функций распределения для оценки физических характеристик систем

#### 3.1. Средние значения некоторых характеристик движения молекул в идеальном газе

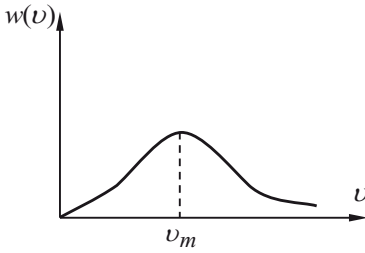


Рис.13

На (Рис. 13) приведено распределение функции  $w(v) = \frac{dw}{dv}$ . Несмотря на то, что наиболее вероятное значение декартовой компоненты скорости равно нулю, наиболее вероятное значение абсолютной величины скорости  $v_m$  равно вполне определенной величине:

$$v_m = \left( \frac{2k_B T}{m} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (261)$$

Такой парадокс является следствием различного выбора элемента объема: кубик  $dv_x dv_y dv_z$  в декартовом пространстве или сферический слой  $4\pi v^2 dv$  в сферических координатах. Плотность числа молекул в декартовом пространстве скоростей будет наибольшей в нуле и уменьшаться при удалении от начала координат.

Объем же шарового слоя увеличивается пропорционально росту площади его поверхности, и число молекул в элементе объема, которое равно плотности числа молекул, умноженное на элемент объема, будет иметь максимум при некотором значении  $v = v_m$ .

Формула (261) получена из условия  $\frac{dw(v)}{dv} = 0$ . Среднее значение скорости  $\bar{v}$  можно определить из соотношения

$$\bar{v} = \int_0^{\infty} v w(v) dv = \left( \frac{8k_B T}{\pi m} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (262)$$

Среднеквадратичное значение скорости определяется аналогично:

$$(\bar{v}^2)^{\frac{1}{2}} = \left[ \int_0^{\infty} v^2 w(v) dv \right]^{\frac{1}{2}} = \left( \frac{3k_B T}{m} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (263)$$

### 3.2. Вычисление свободной энергии идеального газа

Рассмотрим идеальный газ, находящийся в сосуде объемом  $V$ . Функция Гамильтона такой системы имеет вид (254). Если на газ действуют только упругие силы стенок, то его потенциальную энергию можно положить равной нулю внутри объема и бесконечности – на его стенках. Тогда статистический интеграл  $Z$  (240) для данного случая запишем следующим образом:

$$\begin{aligned}
 Z &= \int e^{-\frac{1}{k_B T} \sum_{i=1}^N \left[ \frac{p_{x_i}^2 + p_{y_i}^2 + p_{z_i}^2}{2m} + U(x_i, y_i, z_i) \right]} \prod_{i=1}^N dx_i dy_i dz_i dp_{x_i} dp_{y_i} dp_{z_i} = \\
 &= \prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{p_{x_i}^2 + p_{y_i}^2 + p_{z_i}^2}{2mk_B T}} dp_{x_i} dp_{y_i} dp_{z_i} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{U(x_i, y_i, z_i)}{k_B T}} dx_i dy_i dz_i.
 \end{aligned}
 \tag{264}$$

Нормировочный множитель  $B$  в целях простоты пока опускаем. Так как  $U=0$  внутри сосуда и равно бесконечности на его стенках, то каждый из интегралов по координатам  $x_i, y_i, z_i$  будет равен объему сосуда  $V$ , а произведение всех таких интегралов будет  $V^N$ . Интегралы по импульсам сводятся к интегралам Пуассона:

$$\int_{-\infty}^{\infty} -\alpha \xi^2 d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \tag{265}$$

и в связи с этим произведение интегралов по импульсам будет равно  $(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}N}$ . В итоге величина статистического интеграла для идеального газа будет выражаться формулой

$$Z = V^N (2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}N} \quad (266)$$

Свободная энергия (239) в этом случае запишется в следующем виде:

$$F = -Nk_B T \ln V - \frac{3}{2} Nk_B T \ln k_B T - \frac{3}{2} Nk_B T \ln(2\pi m) \quad (267)$$

Из выражения (267) определим некоторые характеристики идеального газа:

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V} = k_B N \frac{T}{V}; \quad S = -\frac{\partial F}{\partial T} = k_B N \left[ \ln V + \frac{3}{2} \ln k_B T + \frac{3}{2} \ln(2\pi m) + \frac{3}{2} \right], \quad (268)$$

$$\bar{E} = F - T \frac{\partial F}{\partial T} = \frac{3}{2} k_B N T; \quad C_V = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{3}{2} k_B N.$$

Из термодинамики известно, что для одного моля идеального газа теплоемкость равна  $C_V = \frac{3}{2} R$  (где  $R$  - универсальная газовая постоянная). С учетом этого можно записать

$$R = k_B N_A, \quad (269)$$

где  $N_A$  - число Авогадро.

### 3.3. Средняя энергия квантового осциллятора

Как известно из квантовой механики, энергия квантового осциллятора выражается формулой (157):

$$E_k = \left(k + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (270)$$

Для определения свободной энергии  $F$  вычислим статистическую сумму  $Z$  (247) с энергией (270):

$$Z = \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{E_k}{k_B T}} = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}}}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}} \quad (271)$$

Свободная энергия  $F$  в этом случае будет определяться выражением

$$F = -k_B T \left[ -\frac{\hbar\omega}{2k_B T} - \ln\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}\right) \right] \quad (272)$$

Для вычисления средней энергии  $\bar{E}$  воспользуемся формулой Гиббса–Гельмгольца:

$$\bar{E} = F - T \frac{\partial F}{\partial T} \quad (273)$$



Подставляя в эту формулу выражение для  $F$ , получим

$$\bar{E} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}. \quad (274)$$

При высоких температурах, когда  $k_B T \gg \hbar\omega$ ,

$$e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{k_B T}. \quad (275)$$

Подставляя(275) в (274), получим

$$\bar{E} \approx k_B T, \quad (276)$$

т.е. известное выражение для средней энергии классического осциллятора.

При очень низких температурах  $k_B T \ll \hbar\omega$  единиц в знаменателе второго слагаемого в (274) можно пренебречь. Тогда

$$\bar{E} = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}. \quad (277)$$

В этом случае при  $T \rightarrow 0$   $\bar{E} \rightarrow \frac{\hbar\omega}{2}$ , т.е. в этой области температур «работают» законы квантовой механики.

### 3.4. Уравнение состояния для Ферми и Бозе газов

Число частиц  $dN$  в элементе фазового пространства

$$d\Gamma = dx dy dz dp_x dp_y dp_z \text{ равно}$$
$$dN = \bar{n} g d\Gamma, \quad (278)$$

где  $\bar{n}$  – функция распределения Ферми и Бозе частиц,

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu_s}{k_B T}} \pm 1}, \quad (279)$$

$g$  – кратность вырождения ( $g=2S+1$ ,  $S$  – спиновое квантовое число), знак (+) относится к Ферми частицам, а (–) – к Бозе частицам. Здесь учитывается, что при данном значении импульса состояние частицы определяется также ее спином. Энергия  $\varepsilon$  частицы здесь квази-классична и равна

$$\varepsilon = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2). \quad (280)$$

Интегрируя (278) по  $x, y, z$ , и переходя в сферическую систему координат в пространстве импульсов после интегрирования по углам  $\theta$  и  $\varphi$ , в итоге получим

$$dN_p = \frac{gVp^2 dp}{2\pi^2 \hbar^3 \left( e^{\frac{\varepsilon - \mu_s}{k_B T}} \pm 1 \right)}. \quad (281)$$

Так как  $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ , то формулу (281) можно переписать следующим образом:

$$dN_\varepsilon = \frac{gVm^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}} \pi^2 \hbar^3} \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu_s}{k_B T}} \pm 1}. \quad (282)$$

Полное число частиц  $N$  определится интегрированием этого выражения:

$$N = \frac{gVm^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}} \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu_s}{k_B T}} \pm 1}. \quad (283)$$

В формуле для потенциала  $\Omega$  (242) от суммирования перейдем к интегрированию:

$$\Omega = \mp \frac{gVm^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}} \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \ln \left( 1 \pm e^{\frac{\mu_s - \varepsilon}{k_B T}} \right) d\varepsilon. \quad (284)$$

После интегрирования получим

$$\Omega = -\frac{2}{3} \frac{gVm^2}{2^2 \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^2 d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu_s}{k_B T}} \pm 1}. \quad (285)$$

Найдем полную энергию газа  $E$ :

$$E = \int_0^\infty \varepsilon dN = \frac{gVm^2}{2^2 \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^2 d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu_s}{k_B T}} \pm 1}. \quad (286)$$

Сравнивая формулы (285) и (286) и имея в виду, что  $\Omega = -PV$ , получим:

$$PV = \frac{2}{3} E. \quad (287)$$

Это, как известно, есть основное уравнение молекулярно-кинетической теории газов.

Статистическая физика, как следует из вышеизложенного, изучает скрытые от «невооруженного» глаза микроскопические механизмы тепловой формы движения материи, переходя от них к макроскопическим термодинамическим законам, характеризующим всю систему в целом (см. зависимости термодинамических потенциалов  $E, F, G, H$  от параметров  $P, V, T, S$ ).

Известно, что термодинамическую температуру  $T$  «внешне» можно определить через внутреннюю энергию  $E$  или энтальпию  $H$  как  $(\frac{\partial E}{\partial S})_V$  или  $(\frac{\partial H}{\partial S})_P$ . Температура в узком смысле определяет здесь

интенсивность хаотического движения молекул. Можно, однако, попытаться это сделать «изнутри».

Пусть, например, имеется одноатомный газ, атомы которого могут находиться в двух состояниях: основном (0) и возбужденном (1) (двухуровневая система). Разность энергий между уровнями обозначим как  $\varepsilon$ . Температуру в этом случае можно ввести следующим образом

$$T = \frac{\varepsilon}{k_B} \left( \ln \frac{N_0}{N_1} \right)^{-1},$$

где  $N_0, N_1$  числа атомов в невозбужденном и возбужденном состояниях. Распределения  $N_0, N_1$  носят, очевидно, бoльцмановский характер.

### 3.5. Теплоемкость твердого тела

Существенной особенностью твердого тела, в противоположность газу и жидкости, является то, что его атомы колеблются около некоторых фиксированных в пространстве положений равновесия. Таким образом, при достаточно малых амплитудах колебаний атомов твердое тело можно рассматривать как механическую систему с большим числом степеней свободы. Из классической механики известно, что для такой системы из  $N$  атомов можно ввести нормальные координаты  $q_i$ , число которых равно числу степеней свободы системы  $3N$ . Функция Гамильтона такой системы в гармоническом приближении имеет вид

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^{3N} \left( \frac{1}{2m_i} p_i^2 + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 q_i^2 \right), \quad (288)$$

где  $p_i$  — обобщенные импульсы, сопряженные с нормальными координатами  $q_i$ ;  $m_i$  — постоянные коэффициенты, в частности, массы атомов;  $\omega_i$  — частоты нормальных колебаний. Можно сказать, что в гармоническом приближении тепловое движение  $N$  атомов твердого тела может быть представлено как совокупность  $3N$  независимых нормальных колебаний или мод.

Из теоремы о равномерном распределении энергии по степеням свободы следует, что если функция Гамильтона имеет вид (288), то энергия твердого тела может быть записана как

$$\tilde{E} = \sum_{i=1}^{3N} \left( \left\langle \frac{1}{2m_i} p_i^2 \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 q_i^2 \right\rangle \right) = \sum_{i=1}^{3N} \left( \frac{k_A T}{2} + \frac{k_A T}{2} \right) = 3Nk_A T. \quad (289)$$

Теплоемкость  $C_V$  одного моля твердого тела при постоянном объеме равна

$$C_V = \frac{\partial \tilde{E}}{\partial T} = 3N_A k_A = 3R = 5,94 \text{ ккал/моль} \cdot \text{град}. \quad (290)$$

Это так называемый закон Дюлонга – Пти.

Однако экспериментальные исследования показали, что теплоемкость при понижении температуры (в области криогенных температур) уменьшается в решительном противоречии с выводами классической статистики (290).

Среднюю энергию грамм-молекулы твердого тела с учетом (274) можно записать:

$$\tilde{E} = 3N_A \bar{E} = 3N_A \left[ \frac{\hbar \omega}{2} + \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_A T}} - 1} \right], \quad (291)$$

тогда формула для теплоемкости  $C_V$  будет иметь следующее выражение:

$$C_V = \frac{\partial \tilde{E}}{\partial T} = 3R \left( \frac{T_E}{T} \right)^2 \frac{\exp\left(\frac{T_E}{T}\right)}{\left[ \exp\left(\frac{T_E}{T}\right) - 1 \right]^2}, \quad (292)$$

где  $T_E = \frac{\hbar \omega}{k_A}$  – характеристическая температура Эйнштейна.

При высоких температурах, когда  $T > T_E$ , получаем, что  $C_V = 3R$ , а при низких температурах, когда  $T \ll T_E$ ,

$$C_V = 3R \left( \frac{T_E}{T} \right)^2 e^{-\frac{T_E}{T}}. \quad (293)$$

Из (293) следует, что при  $T \rightarrow 0$  теплоемкость  $C_V$  стремится к нулю по экспоненциальному закону, хотя на опыте убывание  $C_V$  твердых тел происходит не так быстро.

Более строгая квантовая теория теплоемкости твердого тела требует учета всех возможных колебаний его атомов, то есть учета всего спектра нормальных колебаний. Так как твердое тело – система с огромным числом степеней свободы, то распределение частот нормальных колебаний носит квазинепрерывный характер. Энергию твердого тела в этом случае можно представить следующим образом

$$\tilde{E} = \int_0^{\omega_{\max}} \bar{E}q(\omega)d\omega = \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar\omega}{2}q(\omega)d\omega + \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar\omega q(\omega)d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}, \quad (294)$$

где  $\omega_{\max}$  – максимальная частота колебаний атомов твердого тела;  $q(\omega)$  – число колебаний на единичном интервале частот. Определение  $q(\omega)$  для кристалла связано с большими трудностями. Экспериментально  $q(\omega)$  может быть получена методами нейтронографии. Для теоретического определения  $q(\omega)$  в случае одноатомного тела П. Дебай в 1912 г. воспользовался моделью однородной изотропной непрерывной упругой среды. Он нашел, что в этом случае

$$q(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v_o^3} \omega^2, \quad (295)$$

где  $\frac{1}{v_o^3} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{v_e^3} + \frac{2}{v_t^3} \right)$ ,  $v_e$ ,  $v_t$  – скорость продольных и поперечных упругих волн в твердом теле. Максимальную частоту  $\omega_{\max}$  Дебай определил из того условия, что полное число нормальных колебаний равно числу степеней свободы твердого тела:



$$\int_0^{\omega_{\max}} q(\omega) d\omega = 3N. \quad (296)$$

Подставляя (295) в (296), получим, что:

$$\omega_{\max} = \nu_o \left( \frac{6\pi^2}{\Omega_o} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (297)$$

где  $\Omega_o = \frac{V}{N}$  – объем, приходящийся на один атом.

С учетом (295) оценим энергию твердого тела (294):

$$\tilde{E} = \tilde{E}_o + 3RTD\left(\frac{T_D}{T}\right), \quad (298)$$

где  $\tilde{E}_o = \frac{3V\hbar}{16\pi^2\nu_o^3}\omega_D^4$ ;  $D(t) = \frac{3}{t^3} \int_0^t \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$  – функция Дебая;  $T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_A}$  –

температура Дебая, здесь  $\omega_D \equiv \omega_{\max}$  – частота Дебая.

Если произвести оценку теплоемкости, то для высоких температур получим классическое выражение  $C_V = 3R$ . Для низких температур

$$C_V = \frac{12Nk_A\pi^4 T^3}{5T_D^3}, \quad (299)$$

что весьма удовлетворительно соответствует результатам эксперимента. Формула (299) носит название закона Дебая.

#### 4. Фазовые переходы

Описание фазовых переходов представляет собой одну из наиболее сложных проблем теоретической физики. Как указывалось в разд. 10, состояние равновесной системы в термодинамике полностью описывается соответствующим термодинамическим потенциалом, определяемым парой переменных  $S, V$ ;  $S, P$ ;  $V, T$ ;  $P, T$ , где  $S$  – энтропия,  $V$  – объем,  $P$  – давление,  $T$  – температура). Эти переменные можно разделить на два класса: экстенсивные, или пропорциональные полной массе системы, такие как энтропия и объем, и интенсивные, или не зависящие от полной массы системы, такие, как температура и давление. Экстенсивные и интенсивные термодинамические величины определяют термодинамические потенциалы как функции сопряженных переменных. Для описания фазовых переходов в твердых телах, например, выбирают пару переменных  $T$  и  $V$ . Если твердое тело находится во внешнем поле (например магнитном) напряженностью  $H$ , то его состояние будет определяться термодинамическим потенциалом – свободной энергией  $F = F(T, V, H)$ . В точке фазового перехода второго рода, (например в ферромагнетике) непрерывными являются  $F$  и ее первые производные: энтропия  $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$ , давление  $P = -\frac{\partial F}{\partial V}$  и

намагниченность  $\mathfrak{I} = -\frac{\partial F}{\partial H}$ . Вторые же производные: теплоемкость

$C_V = T \left( \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)$ , восприимчивость  $\chi = \frac{-\partial^2 F}{\partial H^2}$  и сжимаемость  $\kappa$

$= \frac{1}{V} \frac{\partial^2 F}{\partial V^2}$  имеют особенности, т.е. аномально быстро возрастают при

приближении к критической точке. Для ферромагнетика, помещенного во внешнее магнитное поле напряженностью  $H$  можно записать:

$$\begin{aligned} \mathfrak{I} &\sim (T_c - T)^\beta, \quad \mathfrak{I}(T = T_c) \sim H^{\frac{1}{\delta}}, \quad K(k) \sim k^{-2+s}; \\ \chi &\sim \begin{cases} (T - T_c)^{-\gamma} & T > T_c \\ (T_c - T)^{-\gamma'} & T < T_c \end{cases}, \quad C_V \sim \begin{cases} (T - T_c)^{-\alpha} & T > T_c \\ (T_c - T)^{-\alpha'} & T < T_c \end{cases}, \end{aligned} \quad (300)$$

где  $\alpha, \beta, \gamma, \delta, s$  – критические показатели, определение которых является задачей теории критических явлений.  $K(k)$  – корреляционная функция в пространстве волнового вектора  $\vec{k}$ .

Первой попыткой теоретически описать переход второго рода было создание теории среднего поля, которую изложим на примере ферромагнетика.

#### 4.1. Теория среднего поля

Первые экспериментальные исследования ферромагнетизма были выполнены П. Кюри в 1895 г. Ученым было показано, что восприимчивость  $\chi = \frac{\partial \mathfrak{S}}{\partial H}$  изменяется обратно пропорционально первой степени температуры  $(T - T_c)^{-1}$ , где  $T_c$  – температура упорядочения. Такая зависимость выполняется при температурах выше  $T_c$ . Для объяснения такого поведения  $\chi$  П. Вейс в 1907 г. вводит понятие «молекулярного поля», предполагая, что локальное поле  $\bar{h}$ , действующее на средний магнитный момент атома (потом, в рамках квантовой теории, будет установлено, что этот магнитный момент обусловлен спином электрона на незавершенных оболочках атома) равно суперпозиции внешнего  $\bar{H}$  и внутреннего  $\bar{H}'$  полей.

$$\bar{h} = \bar{H} + \bar{H}'. \quad (301)$$

Причем внутреннее поле  $\bar{H}'$  пропорционально намагниченности  $\tilde{\mathfrak{S}}$ .

$$\bar{h} = \bar{H} + \alpha_1 \tilde{\mathfrak{S}}. \quad (302)$$

Эта формула справедлива для малых значений  $\tilde{\mathfrak{S}}$ . Предположим, что  $\tilde{\mathfrak{S}} = \frac{\alpha_2 \bar{h}}{T}$ , тогда с учетом (302) получим

$$\tilde{\mathfrak{S}} = \frac{\alpha_2 \bar{H}}{T - T_c}, \quad (303)$$

где  $T_c = \alpha_1 \alpha_2$ ,  $\alpha_2 = \frac{n\mu^2}{3k_A}$ ,  $n$  – концентрация,  $\mu$  – магнитный момент.

Из (303) следует, что  $\chi \sim (T - T_c)^{-1}$  (закон Кюри – Вейса).

Таким образом при температуре  $T$ , стремящейся к  $T_c$ , намагниченность  $\tilde{\mathfrak{S}}$  и восприимчивость  $\chi$  расходятся. Физическая природа  $\alpha_1$  и ее численное значение оставались в то время серьезной проблемой теории среднего поля.

Из вышеприведенных рассуждений следует, что

$$\gamma = 1. \quad (304)$$

Удовлетворительная (хотя и неполная) интерпретация явления ферромагнетизма нашла решение в рамках квантовой теории (В. Гейзенберг, 1928 г.). Механизм внутренней намагниченности в рамках подхода Гейзенберга состоит в обменном взаимодействии спинов электронов соседних атомов. Внутреннее поле  $\bar{H}'$  («молекулярное» поле Вейса) обусловлено суммарным полем магнитных моментов электронов, окружающих данный конкретный ион. Если электронные волновые функции компактно локализованы, то основной вклад в обменную энергию вносят парные взаимодействия соседних ионов. Энергия взаимодействия  $U_{i\dot{a}i}$  имеет в этом случае следующий вид:

$$U_{i\dot{a}i} = -2 \sum_{i>j} \mathfrak{J}_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j, \quad (305)$$

где  $\mathfrak{J}_{ij}$  – обменный интеграл;  $\vec{S}_i, \vec{S}_j$  – спины соседних  $i$ -го и  $j$ -го атомов.

Как следует из (305), минимум энергии  $U_{i\hat{a}i}$  соответствует одинаковой ориентации спинов  $\vec{S}_i$  и  $\vec{S}_j$ . Из квантовой теории Гейзенберга, в частности, следует, что критическая температура  $T_c$  может быть определена как

$$T_c = 2\mathfrak{r}S(S+1)/3k_A, \quad (306)$$

где  $r$  – число ближайших соседей,  $S$  – значение спина.

Для больших значений величин  $\mathfrak{S}$  в выражении для локального поля (302) необходимо учесть слагаемые более высокого порядка

$$\bar{h} = \bar{H} + \alpha_1 \vec{\mathfrak{S}} - \alpha_3 \mathfrak{S}^2 \vec{\mathfrak{S}}, \quad (307)$$

где  $\alpha_3$  – постоянная величина.

Для этого случая получим

$$\vec{\mathfrak{S}} \left( 1 - \frac{T_c}{T} + \frac{\alpha_1 \alpha_3 \mathfrak{S}^2}{T} \right) = \frac{\alpha_1 \bar{H}}{T}. \quad (308)$$

При  $T = T_c$  из (308) следует, что  $\mathfrak{S} \sim H^{\frac{1}{3}}$ , кроме того, для  $T < T_c$   $\chi \sim (T_c - T)^{-1}$ . Для магнитной энергии  $W_m = -\vec{\mathfrak{S}}\bar{H}$  получаются следующие соотношения:  $W_m \sim (T_c - T)^{-1}$  – для  $T < T_c$  и  $W_m = 0$  – для  $T > T_c$ . Из вышеприведенного формализма, который получил название теории среднего поля, можно определить значения критических индексов:  $\beta = \frac{1}{2}$ ,  $\delta = 3$ ,  $\gamma = \gamma' = 1$ .

Особое внимание здесь следует обратить на то, что в рамках совершенно ясных и простых предположений оказывается возможным определить температуру фазового перехода  $T_c$  через постоянные величины, характеризующие средний магнитный момент и локальное магнитное поле на нем.

## 4.2. Теория Ландау

Анализируя уже созданные теоретические концепции для описания тех или иных физических явлений, можно утверждать, что успех всякой теории зависит от того, какие понятия и категории кладутся в ее основание. В 1937 г. Л.Д.Ландау вводит определенную характеристику  $\rho$  системы, которая своим поведением отслеживает фазовый переход и его критическую точку. Величина  $\rho$ , в частности, связана с намагниченностью в ферромагнетиках, поляризацией в сегнетоэлектриках, плотностью заряда в кристаллах при структурных переходах, плотностью вещества в системах жидкость–пар. Для описания явления сверхпроводимости величина  $\rho$  связывалась с суперпозицией амплитуд состояния  $\psi$  куперовских пар бозонов

$$\bar{\psi} = \frac{1}{V} \int \psi(\vec{r}) dV. \quad (309)$$

Для описания перехода жидкого гелия в сверхтекучее состояние с этой же целью используется аналогичное выражение:

$$\bar{\varphi} = \frac{1}{V} \int \varphi(\vec{r}) dV, \quad (310)$$

где  $\varphi(\vec{r})$  – амплитуды состояний бозонов.

Выше точки перехода величину  $\rho$  обозначим  $\rho_o$ . Причем  $\rho_o$  инвариантна относительно совокупности операций симметрии, которая определяет группу  $\Gamma_o$ . Ниже точки перехода параметр  $\rho$  обозначим  $\rho_1$ . В свою очередь  $\rho_1$  инвариантна относительно всех операций группы  $\Gamma_1$ , являющейся подгруппой группы  $\Gamma_o$ .

Разложим  $\delta\rho = \rho_o - \rho_1$  по базисным функциям  $u$ , описывающим неприводимые представления группы  $\Gamma_o$ :

$$\delta\rho = \sum_n \sum_{i=1} C_i^{(n)} u_i^{(n)}, \quad (311)$$

где  $n$  – номер представления,  $i$  – номер функции в базисе представления. Штрих у суммы означает, что из суммы исключено единичное представление, поскольку оно уже включено как в  $\rho_o$ , так и в  $\rho_1$ . При  $T = T_c$  все  $C_i^{(n)}$  должны обращаться в 0 (так как  $\delta\rho = 0$ ).

Коэффициенты  $C_i^{(n)}$  характеризуют систему, находящуюся в термодинамическом равновесии ниже точки перехода и поэтому их значения можно определить путем минимизации свободной энергии  $F$  (чаще используют ее плотность  $f$ ).

Например, при фазовом переходе II рода эти коэффициенты принимают сколь угодно малые значения, в связи с чем  $f$  может быть разложена в ряд по степеням  $C_i^{(n)}$ .

$$f(P, T, C_i^{(n)}) = f_o(P, T) + \sum_n A^{(n)}(P, T) \sum_i C_i^{(n)} + \dots, \quad (312)$$

где  $f_o(P, T)$  – свободная энергия в неупорядоченной фазе.

Каждый член разложения содержит только такие комбинации величин  $C_i^{(n)}$ , которые инвариантны при всех операциях группы  $\Gamma_o$ . Инвариант линейный по  $C_i^{(n)}$  отсутствует, поскольку исключено еди-



ничное представление. Наличие линейного члена привело бы к понижению симметрии группы.

Минимизация  $f$  при  $T = T_c$  должна приводить к условию  $C_i^{(n)} = 0$ . Это возможно только в том случае, если коэффициенты  $A_i^{(n)}$  неотрицательные. Определим параметр порядка  $\eta_i \equiv C_i^{(n)}$ . Здесь число линейно независимых компонент параметра порядка равно размерности представления, по которому он преобразуется.

Для однокомпонентного параметра порядка  $\eta$  в случае фазового перехода II рода можно в простейшем случае записать:

$$f(P, T, \eta) = f_o(P, T) + a(T - T_c)\eta^2 + q_2\eta^4. \quad (313)$$

Симметрия тела меняется (повышается) тогда, когда  $\eta$  обращается в точности в 0. Если  $\eta \neq 0$ , хотя и очень мал, это означает наличие более низкой симметрии.

Как показали дальнейшие исследования в этой области на языке параметра порядка можно попытаться создать наиболее общий подход к построению соответствующей теории критических явлений.

Подставляя в условие  $\frac{\partial f}{\partial \eta} = 0$  выражение (313) получим:

$$2q_2\eta^2 + a(T - T_c) = 0. \quad (314)$$

Откуда следует, что

$$\eta^2 = \frac{a(T_c - T)}{2q_2}. \quad (315)$$

Таким образом  $\eta \sim (T_c - T)^{\frac{1}{2}}$ .

Пренебрегая слагаемым с  $\eta^4$ , определим энтропию  $S$  и молярную теплоемкость при постоянном давлении  $C_p$ :

$$S = -\frac{\partial f}{\partial T} = -\frac{\partial f_o}{\partial T} - a\eta^2 = S_o - \frac{a^2(T_c - T)}{2q_2}, \quad (316)$$

$$C_p = T \frac{\partial S}{\partial T} = T \frac{\partial S_o}{\partial T} + T \frac{a^2 T_c}{2q_2} = C_{p_o} + \frac{a^2 T_c}{2q_2}. \quad (317)$$

Как следует из (316) и (317), энтропия при фазовом переходе остается непрерывной, а теплоемкость испытывает скачок на величину  $\frac{a^2 T_c}{2q_2}$ .

Введение параметра порядка позволило более однозначно определить (и разделить) фазовые переходы. Ранее, по классификации П. Эренфеста (1933 г.), к фазовым переходам I рода относили такие изменения агрегатного состояния вещества, когда в точке перехода  $T_c$  претерпевают разрыв уже первые производные от  $f$ . Фазовый переход II рода здесь характеризуется разрывом вторых производных (см., например, поведение теплоемкости при переходе в сверхпроводящее состояние). Однако, как показывает анализ, не все фазовые переходы подпадают под условия Эренфеста. Введение параметра порядка позволяет дать более универсальную классификацию фазовых переходов: если параметр порядка при переходе обращается в нуль скачком, то этот переход следует отнести к фазовому переходу I рода. Фазовый переход II рода характеризуется непрерывным обращением в нуль параметра порядка, так как в этом случае существует взаимосвязь между типами симметрии состояния вещества слева и справа от точки  $T_c$ .

Недостатком теории среднего поля, а также теории Ландау, несмотря на их простоту и ясность роли, которую играет параметр порядка, является то, что эти теории не учитывают наиболее существенную особенность поведения системы вблизи критической

точки. Дело в том, что при любом фазовом переходе образование новой фазы начинается с появлением зародышей (а это значит, что в объеме с определенным значением параметра порядка, например, с нулевым, появляются участки, где величина  $\eta > 0$ ). Флуктуационная природа зародышей при описании фазового перехода вблизи критической точки должна быть представлена как флуктуации параметра порядка. При приближении температуры к критической точке флуктуации растут, становятся термодинамически устойчивыми образованиями, соединяются в более крупные области и в итоге весь объем переходит в новое состояние, каждая точка которого характеризуется параметром порядка  $\eta > 0$ . Говоря иными словами, при  $T \rightarrow T_c$  возрастающие флуктуации параметра порядка начинают коррелировать между собой (за счет какого-то взаимодействия), приводя к увеличению областей с  $\eta > 0$  и переходу всего объема в другую фазу.

Какие наиболее существенные особенности фазовых переходов надо учесть и положить в основу новой флуктуационной теории? В первую очередь необходимо иметь в виду одинаковость критических индексов (300) для всех фазовых переходов и, как следствие, тот факт, что микроскопические детали поведения системы никакой роли в критических явлениях не играют. Это наводит на мысль о действии фундаментальных законов симметрии, которые каким-то образом необходимо сформулировать или просто угадать (яркие примеры «угадывания» в большом количестве имеются в квантовой физике: постулаты Бора, принцип Паули, уравнение Шрёдингера, гипотеза Уленбека и Гаудсмита о наличии спина электрона и др.). Действительно, многие фундаментальные характеристики, например:

квантовые числа, правила отбора, кратность вырождения, связаны со свойствами симметрии изучаемых физических объектов. Если это атом, то мы «работаем» с гамильтонианом  $H = H_0 + H_1$ , где  $H_0$  – инвариантен при вращениях с центром в ядре атома, а  $H_1$  – малое возмущение, которое может быть обусловлено внешним магнитным, электрическим или электромагнитным полями, внешним давлением и др. причинами). Возмущение  $H_1$  неинвариантно при вращениях, однако может быть хорошо разложено по представлениям группы вращений.

Если система обладает какой-то симметрией, то применение к ней соответствующих преобразований (например, подробно рассматриваемые ниже элементы симметрии: трансляции, повороты, отражения и др., приводящие к самосовмещению того же кристалла) позволяет извлечь уникальную информацию о свойствах системы. Наиболее яркий пример такого описания можно найти в разд. 5 «Операторы квантовой механики», где операция симметрии – поворот на угол  $2\pi$ , совмещающая систему саму с собой, применяется к собственной функции оператора проекции момента импульса. В результате этого получается фундаментальный закон микромира о квантовании самой проекции момента импульса и появляется магнитное квантовое число  $m$ .

Было бы неплохо ввести такую группу симметрии, действие элементов которой на некоторую функцию, описывающую фазовый переход, привело бы к определению критических индексов (300) аналогично приведенному выше примеру с получением квантового числа  $m$ . При этом система должна оставаться инвариантной и описываться в критической точке  $T = T_c$  гамильтонианом  $H_0$ , а при

$T \neq T_c$  будет учитываться неинвариантное возмущение  $H_1$ . Кроме того, в рамках определенных преобразований симметрии свойства системы вблизи критической точки  $T_c$  должны быть связаны с ее свойствами вдали от точки перехода, когда флуктуации параметра порядка малы и хорошо описываются известными методами. И теперь самым существенным моментом в построении физико-математического формализма, описывающего фазовый переход, является определение меры «близости» или «удаленности» системы по отношению к критической точке. Для этого рассмотрим самую характерную особенность протекания фазового перехода – возрастание флуктуаций параметра порядка и их корреляцию при  $T \rightarrow T_c$ , о чем говорилось в разделе, посвященном теории Ландау.

Для определенности в качестве параметра порядка  $\bar{\eta}$  возьмем локальную намагниченность ферромагнетика

$$\bar{\eta} = \frac{\bar{\mathfrak{M}}}{\bar{\mathfrak{S}}_m} = \frac{\overline{\Delta M}}{\bar{\mathfrak{S}}_m \Delta V}, \quad (318)$$

где  $\overline{\Delta M}$  – магнитный момент локального объема  $\Delta V$ ,  $\bar{\mathfrak{S}}_m$  – намагниченность при полном упорядочении.

Корреляционную функцию  $K(\vec{r})$ , характеризующую взаимное соответствие намагниченностей в различных точках  $\Gamma_o$  и  $\vec{r}_2$  объема материала введем по определению

$$K(\vec{r}) = \langle \overline{\Delta \eta}(\vec{r}_1) \overline{\Delta \eta}(\vec{r}_2) \rangle, \quad (319)$$

где  $\overline{\Delta \eta} = \bar{\eta} - \langle \bar{\eta} \rangle$ ,

$$\langle \overline{\Delta \eta}(\vec{r}_1) \overline{\Delta \eta}(\vec{r}_2) \rangle = C \int \overline{\Delta \eta}(\vec{r}_1) \overline{\Delta \eta}(\vec{r}_2) e^{-\frac{\Delta H(\vec{X})}{k_A T}} d^d X, \quad (320)$$

$C$  – нормировочный множитель,  $H(\vec{X})$  – гамильтониан системы, зависящий от совокупности переменных  $X$  (их конкретный вид будет приведен ниже),  $d$  – размерность.

Формула (320) отражает корреляционную связь между флуктуациями параметра порядка  $\overline{\Delta\eta}$  в различных точках пространства, разделенных расстоянием  $\vec{r}$  ( $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$ ). Возрастание  $K(\vec{r})$  означает переход системы в упорядоченное (ферромагнитное) состояние, когда все магнитные моменты атомов ориентированы в одном направлении. Гамильтониан системы может быть выражен через плотность  $f$  в известной форме Гинзбурга –Ландау:

$$f = f_0 + a_1 \Delta T \bar{\eta}^2 + q_2 \bar{\eta}^4 + q_3 (\vec{\nabla} \bar{\eta})^2 - R \eta, \quad (321)$$

где  $R$  – внешнее поле, сопряженное с параметром порядка  $\bar{\eta}$ ,  $\Delta T = T_c - T$ . Слагаемые в (321) имеют следующий явный вид:

$$\bar{\eta}^2 = \sum_{i=1}^n (\eta_i(\vec{r}))^2; \quad (\vec{\nabla} \bar{\eta})^2 = \sum_{j=1}^d \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \eta_j}{\partial x_i} \right)^2, \quad (322)$$

где  $n$  – число компонент параметра порядка.

Рассмотрим симметричную фазу в отсутствие поля  $R$  и ограничимся членами второго порядка ( $R = 0$ ,  $q_2 = 0$ ). В этом случае  $\langle \bar{\eta} \rangle = 0$  и  $\overline{\Delta\eta(\vec{r})} = \bar{\eta}(\vec{r})$ . Изменение гамильтониана теперь запишется следующим образом:

$$\Delta H = \int \left[ a_1 \Delta T (\overline{\Delta\eta})^2 + q_3 (\vec{\nabla} \bar{\eta})^2 \right] dV. \quad (323)$$

Переведем корреляционную функцию  $K(\vec{r})$  в пространство волнового вектора  $\vec{k}$ :

$$K(\vec{k}) = \int \langle \overline{\Delta\eta(\vec{r}_1)} \overline{\Delta\eta(\vec{r}_2)} \rangle e^{-i\vec{k}\vec{r}} dV, \quad (324)$$

для чего разложим  $\overline{\Delta\eta}$  в ряд Фурье:

$$\overline{\Delta\eta}(\vec{r}) = \sum_k \overline{\Delta\eta}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (325)$$

где  $\overline{\Delta\eta}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$  – мода с длиной волны  $\lambda$ ,

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}. \quad (326)$$

Проводя соответствующие преобразования, в конечном итоге получим

$$K(\vec{k}) = \left\langle \left| \overline{\Delta\eta}(\vec{k}) \right|^2 \right\rangle, \quad (327)$$

где

$$\left\langle \left| \overline{\Delta\eta}(\vec{k}) \right|^2 \right\rangle \sim \frac{1}{q_3 k^2 + a_1 \Delta T}. \quad (328)$$

Когда температура приближается к критической точке  $T_c$  ( $\Delta T \rightarrow 0$ ), возрастание корреляционной функции  $K(\vec{k})$  обусловлено корреляцией длинноволновых флуктуаций с  $k \rightarrow 0$  (длина волны  $\lambda \rightarrow \infty$ ). Это является существенным указанием на то, что вблизи критической точки соответствующий гамильтониан, описывающий систему, можно заменить «сглаженным», в котором оставлены только малые  $k$ . Необходимость упрощения гамильтониана  $H(p, q)$  связана, в первую очередь, с тем, что определение статистического интеграла (240) в общем случае не представляется возможным. Кроме того, проблема учета критических флуктуаций вообще выводит статистическую задачу (239), (219)–(225) из разряда решаемых. Величину  $H(p, q)$  можно заменить эффективным гамильтонианом  $H_0$ , сохраняющим основные качественные свойства  $H(p, q)$ , определяющие поведение системы вблизи критической точки. К этим основным свойствам системы относят ее размерность, число компонент параметра порядка, симметрию системы и зависимость межатомных сил взаимодействия от геометрии системы. Следует

отметить, что упрощение функции  $H(p, q)$  в целях возможности описания системы не представляет собой ничего из ряда вон выходящего, так как при описании любого явления в физике мы всегда прибегаем к построению модели – упрощенному образу этого явления («скелету» явления), который и заменяет само явление в исследованиях. Самым существенным здесь является то, что адекватная модель должна обладать не обязательно всеми, но наиболее существенными свойствами самого явления.

Так как

$$K(\vec{r}) \sim \int K(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3k, \quad (329)$$

то

$$K(\vec{r}) \sim e^{-\frac{r}{\xi}}, \quad (330)$$

где

$$\xi = \left( \frac{q_3}{a_1 \Delta T} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (331)$$

Величина  $\xi$  называется корреляционной длиной, она характеризует размер области, где флуктуации параметра порядка скоррелированы между собой. Это, очевидно, области новой фазы. При построении теории критических явлений следует учесть также тот факт, что для конечного числа частиц гамильтониан системы является гладкой функцией и особенностей в поведении физических характеристик системы (теплоемкости и др.) ожидать не следует. Это указывает на то, что в рассмотрение следует вовлекать все большее количество атомов ( $L^d \rightarrow \infty$ , где  $L$  – линейные размеры системы, определяемые, например, числом постоянных решетки  $a$  на длине  $L$ ).



### 4.3. Основные идеи современной теории критических явлений

Из (330)–(331) следует, что величиной, отслеживающей «расстояние» до критической точки, может быть корреляционная длина, растущая при  $T \rightarrow T_c$ . Это единственный физически ясный и количественно определяемый параметр, который можно положить в основу теории. Корреляционная длина  $\xi$ , характеризующая области скоррелированных флуктуаций параметра порядка (это, например, области ферромагнетика с одинаково ориентированными магнитными моментами атомов), кроме того, при  $T \rightarrow T_c$  «осуществляет» вовлечение в рассмотрение все большее количество атомов системы ( $L^d \rightarrow \infty$ ).

Современная теория критических явлений базируется на двух положениях (гипотезах). Первое положение, получившее название гипотезы подобия, состоит в утверждении, что сингулярное поведение физических характеристик  $\eta$ ,  $\chi$ ,  $C_V$ ,  $K(k)$  при  $T \rightarrow T_c$  (см. формулы (300)) – есть следствие расходимости корреляционной длины (331). В самом общем случае флуктуации параметра порядка  $\Delta\eta$  (325) распределены по сложному статистическому закону.

Если принять, что это распределение подчиняется закону Гаусса, то на  $\xi$  можно определить закономерности в поведении вышеуказанных характеристик фазового перехода.

Для  $T > T_c$ :

$$K(\vec{k}) = \frac{\frac{q_3}{2} \xi^2}{(1 + \vec{k}^2 \xi^2)}, \quad (332)$$

$$\chi = \frac{q_3}{2} \xi^2, \quad (333)$$

$$C_V = C_0 \xi^{4-d} + \Delta(\Delta T, \xi, \vec{k}). \quad (334)$$

Для  $T < T_c$ :

$$K_1(\vec{k}) = \frac{\frac{q_3}{4} \xi^2}{\left(1 + \vec{k}^2 \frac{\xi^2}{2}\right)}, \quad (335)$$

$$\chi = \frac{q_3}{4} \xi^2, \quad (336)$$

$$C_V = C_0' \xi^{4-d} + \Delta(\Delta T, \xi, \vec{k}), \quad (337)$$

где  $\Delta(\Delta T, \xi, \vec{k})$  – менее существенные слагаемые, зависимость которых от температуры и других факторов более слабая. Величина  $\xi$  при этом будет определяться как:

$$\xi \sim \begin{cases} (T_c - T)^{-\nu} \\ (T - T_c)^{-\nu'} \end{cases}. \quad (338)$$

Причем для гауссова приближения  $\nu = \nu' = 0,5$ .

В случае ферромагнетика, например, корреляционная длина определяется по формуле

$$\xi = d_s \left[ \frac{T_c}{6(T_c - T)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (339)$$

где  $d_s$  – среднее расстояние между соседними атомами.

Вторая гипотеза, лежащая в основе теории критических явлений, заключается в предположении о существовании определенной группы симметрии (ренормализационной группы), переводящей гамильтониан системы из произвольной точки в критическую, где он становится инвариантным. В результате таких преобразований должны быть получены критические индексы  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $s$ .

Более конкретно ренормализационную группу можно представить как некоторое преобразование плотности вероятности  $w$  распределения флуктуаций параметра порядка, ведущее при определенных условиях систему к точке  $T_c$ . Причем, сама плотность вероятности  $w$  определяется гамильтонианом  $H(\vec{\eta}): w \sim e^{\frac{H(\vec{\eta})}{k_A T}}$ . Процесс ренормгрупповых преобразований ведет систему по определенной траектории в некотором абстрактном пространстве ( $w \rightarrow w' \rightarrow w'' \rightarrow w''' \rightarrow \dots w_o$ , или, что то же самое:  $H \rightarrow H' \rightarrow H'' \rightarrow \dots H_o$ ). При таком движении к  $T_c$  в гамильтониане  $H(\vec{\eta})$  все более существенную роль согласно (328) должны играть моды  $\Delta\eta(\vec{k})e^{i\vec{k}\vec{r}}$  с  $k \rightarrow 0$  или длинноволновые флуктуации. Процесс заканчивается в так называемой неподвижной точке с инвариантным гамильтонианом  $H_o$ .

В качестве конкретного объекта для иллюстрации действия метода ренормгруппы возьмем опять фазовый переход в ферромагнитной системе. Блочная модель ферромагнетика описывается функцией Гамильтона в форме Гинзбурга–Ландау (321):

$$H(\vec{\eta}) = b^d k_A T \sum_{\vec{r}} \left[ q_1 \vec{\eta}_{\vec{r}}^2 + q_2 \vec{\eta}_{\vec{r}}^4 + \frac{q_3}{2b^2} \sum_{\vec{r}'} (\vec{\eta}_{\vec{r}} - \vec{\eta}_{\vec{r}+\vec{r}'})^2 \right], \quad (340)$$

где  $\vec{\eta}_{\vec{r}}$  – намагниченность блока, определяемая по формуле

$$\vec{\eta}_{\vec{r}} = \sum_{\vec{\ell}} \frac{\vec{\eta}_{\vec{\ell}}}{b^d}, \quad (341)$$

$\vec{\eta}_{\vec{\ell}}$  – намагниченность ячейки,  $b^d$  – число ячеек в блоке,  $\vec{\ell}$  – радиус-вектор центра ячейки,  $\vec{r}$  – радиус-вектор центра блока.

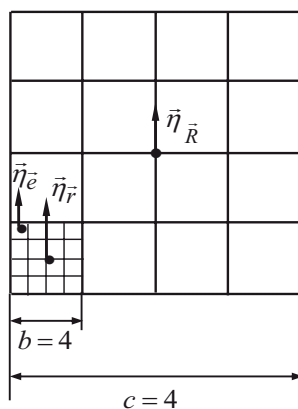


Рис. 14

На рис. 14 представлен двумерный фрагмент блочной конструкции ферромагнетика для конкретных значений  $b = 4$  и  $c = 4$ . Векторами показана намагниченность ячейки в точке с радиусом-вектором  $\vec{l}$ , намагниченность блока в точке с радиусом-вектором  $\vec{r}$  и намагниченность суперблока в точке  $\vec{R}$  ( $\vec{r}$  и  $\vec{R}$  являются усредненными величинами по положениям соответствующих блоков). Намагниченности  $\vec{\eta}_{\vec{r}}$  и  $\vec{\eta}_{\vec{R}}$  также являются усредненными. Сначала рассматривается ячеистая структура вещества и строится ячеистый гамильтониан с взаимодействием между собой магнитных моментов ячеек. Затем из ячеек строим блочную структуру (один блок состоит из  $b^d$  ячеек), состоящую из  $c^d$  блоков.

Процедура конструирования блочного гамильтониана такова, что формируя из  $b^d$  ячеек первичный блок, а впоследствии образуя из  $c^d$  таких блоков суперблок, мы могли бы получить аналогичный результат, формируя из  $(bc)^d$  ячеек тот же самый суперблок.

Процедура получения суперблока из  $c^d$  блоков называется преобразованием Каданова и обозначается  $K_c$ . Как следует из предыдущего замечания,  $K_c K_{c'} = K_{cc'}$ . Это преобразование является основным элементом ренормализационной группы. Гамильтониан

(340) характеризует плотности вероятностей распределения для  $\left(\frac{L}{b}\right)^d$

случайных величин  $\vec{\eta}$ . Эти плотности могут быть полностью охарактеризованы тремя величинами  $q_1, q_2, q_3$ , которые в свою очередь можно представить проекциями вектора  $\vec{q}$  в некотором абстрактном (параметрическом) пространстве. Произвольная

плотность распределения  $w \sim e^{-\frac{H(\vec{\eta})}{k_A T}}$  определяется теперь точкой этого пространства. Следует отметить, что размерность параметрического пространства может быть больше трех в зависимости от вида гамильтониана, описывающего систему (мы рассматриваем простейший случай).

В общем случае изменение гамильтониана можно представить в виде  $dH = \vec{F} d\vec{X}$  (где  $\vec{F}$  – термодинамическая квазисила, «перемещающая» систему вдоль траектории, каждая точка которой характеризуется радиусом-вектором  $\vec{X}$  параметрического пространства).

Действие ренормализационной группы  $R_c$  переводит систему из состояния, описываемого плотностью распределения  $w \sim e^{-\frac{H(\vec{\eta})}{k_A T}}$ , в состояние, описываемое плотностью  $w' \sim e^{-\frac{H'(\vec{\eta})}{k_A T}}$ , что аналогично переходу системы из точки  $\vec{q}$  в точку  $\vec{q}'$  параметрического пространства.

$$\vec{q}' = R_c \vec{q}. \quad (342)$$

Это действие состоит из двух этапов:

– преобразование Каданова, понижающее пространственное разрешение переменных  $\vec{\eta}$  до величины  $bc$ ;

– преобразование величин  $\vec{\eta}_r$ :

$$\vec{\eta}_r = c^p \vec{\eta}'_r, \quad (343)$$

где  $\vec{r}' = \frac{\vec{r}}{c}$ ,  $p$  – некоторая величина, не зависящая от  $c$ . Здесь она определяет структуру масштабирования, а ее конкретное значение находится отдельно для данной сингулярной величины (см. ниже).

Этот элемент ренормгруппы приводит к сжатию системы, уменьшая ее размер в  $c$  раз. При этом длина ребра суперблока  $bc$  становится опять равной  $b$ .

При масштабных преобразованиях пространственный интервал  $\Delta\vec{r}$  переходит в  $\Delta\vec{r}'$ , а волновой вектор  $\vec{k}$  переходит в  $\vec{k}'$ . Причем  $\Delta\vec{r}' = \frac{\Delta\vec{r}}{c}$ , а  $\vec{k}' = c\vec{k}$ . Отсюда следует, что  $\Delta\vec{r}' \cdot \vec{k} = \text{const}$ , т. е. объем ячейки в «фазовом» пространстве при таких преобразованиях остается постоянным.

Таким образом, действие элементов ренормализационной группы  $R_c$  представляет собой процедуру крупнозернистого разбиения (укрупнение блоков как вовлечение в рассмотрение все большего количества атомов с усреднением физических характеристик по объему растущего блока) и изменение масштаба, «совмещающее» систему саму с собой. Следует отметить одну существенную особенность указанных преобразований: среднее преобразованных физических величин (в нашем случае это среднее от преобразованных в новом блоке намагниченностей) по преобразованной плотности

вероятности распределения совпадает со средним значением исходной величины, полученным по исходной плотности распределения.

Ренормализационная группа связана с физикой критических явлений предположением, что критическая точка  $\vec{q}(T_c)$  лежит на критической поверхности неподвижной точки  $\vec{q}_o$ . Точка  $\vec{q}_o$  параметрического пространства, переходящая в самое себя при преобразовании  $R_c$ , называется неподвижной:  $R_c \vec{q}_o = \vec{q}_o$ . В этой точке система описывается симметричным гамильтонианом  $H_o$ . Критическую поверхность неподвижной точки  $\vec{q}_o$  определим как подпространство, все точки которого определяются из условия  $\lim R_c \vec{q} = \vec{q}_o$ . Действие ренормгруппы смещает любую точку на критической поверхности к  $\vec{q}_o$ . Если точка  $\vec{q}$  не лежит на критической поверхности ( $T \neq T_c$ ), то действие группы  $R_c$  приближает ее к  $\vec{q}_o$ , а затем при  $c \rightarrow \infty$  уводит от неподвижной точки  $\vec{q}_o$ . В параметрическом пространстве действие ренормгруппы, смещающее произвольную точку на малое расстояние  $\delta \vec{q}$ , можно представить линейным оператором–матрицей:  $\hat{R}_c = \left( \frac{\partial q'_i}{\partial q_j} \right)_{\vec{q}=\vec{q}_o}$ . Как и в

квантовой механике, собственные функции и собственные значения оператора  $\hat{R}_c$  играют фундаментальную роль, причем собственные значения как раз и определяют критические индексы (300).

Рассмотрим поведение корреляционной функции  $K(\vec{k}, \vec{q}(T))$  при приближении к точке фазового перехода  $T_c$  в ферромагнетике. Корреляционная функция  $K(\vec{k}, \vec{q}(T))$  – экспериментально

определяемая величина, так как сечение рассеяния  $\Sigma$  нейтронов на ферромагнитном кристалле пропорционально  $K(\vec{k})$ :

$$\Sigma \sim VK(\vec{k}, \vec{q}(T)), \quad (344)$$

где  $V$  – объем образца,  $\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}''$ ,  $\vec{k}'$ ,  $\vec{k}''$  – волновые векторы нейтрона до и после рассеяния.

Зарядовая нейтральность нейтрона позволяет отследить тонкие эффекты взаимодействия магнитных моментов нейтрона и атома в узле решетки и, в связи с этим, для опробования теории имеется достоверный эмпирический материал.

Проведем ренормгрупповое преобразование входящих в корреляционную функцию переменных

$$K(\vec{k}, \vec{q}(T)) = c^{2p+d} K(c\vec{k}, R_c \vec{q}(T)) = c^{2p+d} K\left(c\vec{k}, \vec{q}_o \pm \left(\frac{c}{\xi}\right)^{\frac{1}{\nu}} \vec{e}_1\right), \quad (345)$$

где  $(\pm)$  соответствует знаку  $(T - T_c)$ ,  $\vec{e}_1$  – собственный вектор оператора  $\hat{R}_c$ .

Выражение (345) справедливо для любых  $c$  и поэтому положим  $c = \xi$  (так как при  $c \rightarrow \infty$ ,  $\xi \rightarrow \infty$ ). Тогда

$$K(\vec{k}, \vec{q}(T)) = \xi^{2p+d} K(\xi\vec{k}, \vec{q}_o \pm \vec{e}_1) \approx \xi^{2p+d} g(\xi\vec{k}), \quad (346)$$

где  $g(\xi\vec{k})$  – некоторая функция.

При  $T = T_c$ , когда корреляционная длина равна бесконечности, для  $\vec{k} \neq 0$  получим

$$K(\vec{k}, \vec{q}(T_c)) \sim k^{-(2p+d)}. \quad (347)$$

При получении (347) мы положили  $c = \frac{1}{k}$ . Сравнивая с (300)  $2 - s = 2p + d$ ,



получим

$$p = \frac{1}{2}(2 - s - d). \quad (348)$$

Для достаточно малых  $|T - T_c|$  и при  $\vec{k} = 0$  можно записать:

$$K(\vec{0}, \vec{q}(T)) \sim \xi^{2-s} K(\vec{0}, \vec{q}_0 \pm \vec{e}_1) \sim |T - T_c|^{-\nu(2-s)}. \quad (349)$$

Исходя из соотношения  $\frac{\chi}{T} = K(0)$ , (где  $\chi$  – восприимчивость), можно записать:

$$\gamma = \nu(2 - s). \quad (350)$$

Соотношение (350) отражает так называемый закон подобия.

Для оценки критических индексов в конкретной ситуации необходимо, в первую очередь, рассмотреть представление ренормгруппы, т. е. гомоморфное отображение элементов группы на группу линейных операторов. Однако по своей сложности эта процедура выходит за рамки данной книги.

Из более детального анализа следует, что метод ренормгруппы, как и теория Ландау, не позволяет в рамках единого уравнения пройти критическую точку, а поведение системы приходится анализировать отдельно как слева, так и справа от точки фазового перехода. Кроме того, в рамках этого подхода не находят также теоретической оценки критическая температура  $T_c$ . При ренормгрупповом анализе трудно получить традиционные термодинамические характеристики вещества и их функциональную связь между собой.

Ведущий специалист в этой области теоретической физики проф.

Ш. Ма пишет: *«Несмотря на успехи, достигнутые в рамках ренормгруппового подхода к теории критических явлений ему недостает прочной математической основы. Целый ряд вычислений*

*по-прежнему носит пробный характер и многое еще остается непонятным. Этот подход создан на основе установленных фактов и правдоподобных гипотез, истинность которых еще предстоит доказать. Абстрактные идеи, лежащие в основе РГ-подхода весьма просты, однако конкретно реализовать их и явным образом убедиться в их справедливости оказывается очень сложно». Кроме того, прецизионные измерения критических индексов, проведенные в последние годы для различных фазовых переходов, показали их устойчивую неодинаковость. Это определенно указывает на то, что в основу будущей теории должны быть положены не только преобразования ренормализационной группы, но и какие-то дополнительные идеи.*

## КОММЕНТАРИЙ К КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОМУ ОПИСАНИЮ ДВИЖЕНИЯ В МИКРОМИРЕ

В качестве общей характеристики окружающего нас мира необходимо в первую очередь указать на феномен всеобщего взаимодействия материи и движения – как его следствия. Описание этих двух фундаментальных сторон материального мира на различных структурных уровнях и составляет предмет физики. И здесь на первый план выдвигается математика – язык физики, но не как ее «служанка», а как каркас из более фундаментальных законов, на котором формируется «тело» физики. Опыт, будучи критерием истинности физической теории, не определяет отдельно физику и математику, а несет информацию об их едином взаимоотношении. И если эксперимент определяет сумму, то каждое из слагаемых (физика или математика) в отдельности имеет право на некоторый произвол в определенных рамках. Эта ситуация в теоретической физике наиболее выпукло проявилась, в частности, в теории гравитации.

Другой проблемой при описании различных явлений природы является выбор системы категорий, в рамках которых будет вестись данное описание. Естественно, что указанные категории есть результат глубокой абстракции ряда понятий, взятых из окружающего материального мира, основными атрибутами которого являются пространство и время. Само же пространство представляется бесконечно делимым, и любой его интервал может быть также делим до бесконечности. Как же выглядит с точки зрения этих понятий такое простое физическое явление как движение тела в пространстве?

Эта задача была рассмотрена уже в 490–430 гг. до нашей эры Зеноном Элейским, учеником крупнейшего философа того времени Парменида. Парадоксальные выводы, к которым он пришел, получили название апорий Зенона.

В первой апории «Ахиллес и черепаха» Зенон показывает, что если допустить бесконечную делимость протяженности, то Ахиллес, знаменитый спортсмен древней Греции, никогда не догонит черепаху, которая в момент старта была на некотором расстоянии впереди него. Прежде чем догнать ее после стартового выстрела, Ахиллес должен оказаться в точке, где черепаха находилась в момент старта. Но пока наш герой достигает этой точки, черепаха продвинется дальше. Ахиллесу снова предстоит предварительно добежать до точки, куда продвинулась черепаха. Но пока он достигает этой точки, черепаха продвигается еще дальше и т.д. Поскольку считается, что протяженность можно делить бесконечно, и мы при этом будем получать хотя и сколь угодно малые, но все же обладающие протяженностью и, следовательно, делимые и дальше ее элементы (мы предполагаем бесконечную протяженность вглубь), постольку Ахиллес именно в силу бесконечной делимости протяжения не может догнать черепаху.

Вторая апория «Дихотомия» утверждает, что Ахиллес вообще не сдвинется со своего исходного положения. Действительно, движущееся тело, прежде чем пройти весь свой путь, должно пройти половину этого пути, до этого  $1/4$ , до этого  $1/8$  и т.д. Сумма ряда таких дробей никогда не равна единице и, следовательно, сумма частей пути, пройденных телом, никогда не станет равной всему пути.

Введение предела также не решает проблему, так как он по своей сути имеет смысл незавершенного действия.

Здесь естественным образом напрашивается идея введения некоторого далее неделимого отрезка протяжения (кванта пространства) и Зенон это предусмотрел. В апории «Стадион» рассматривается движение в противоположных направлениях двух колонн, 1й и 3й участников соревнований относительно 2й колонны, находящейся между ними и покоящейся. Если допустить, что 1я и 3я колонны сдвинулись друг относительно друга на один неделимый элемент, то мы с необходимостью должны признать, что относительно второй неподвижной колонны каждая из них сдвинется на половину неделимого элемента, что противоречит его исходному статусу неделимости. Таким образом, неделимый отрезок таковым быть не может. То есть апория «Стадион», противореча двум первым, тем не менее углубляет и развивает их, доводя до полного абсурда.

Если все же предположить существование конечного и неделимого отрезка, то внутри каждого из таких отрезков движения быть не может, и, следовательно, летящая стрела, например, должна на этом отрезке покоиться. Сумма же моментов покоя на всей траектории, состоящей из неделимых отрезков, не должна давать никакого движения. Эти рассуждения составляют сущность четвертой апории Зенона – «Стрела». Не зря было сказано противоположность заблуждению не есть истина, она есть обратная сторона заблуждения.

Резюмируя приведенные рассуждения, можно утверждать, что ни тот ни другой подходы не решают проблемы, как представить себе

процесс движения. «Вопрос не о том, есть ли движение, – писал В.И. Ленин, – а о том, как его выразить в логике понятий».

Для решения этих проблем оказалось необходимым ввести новую категорию, категорию единственности, диалектически противоположную категории множественности. Физическим наполнением этой новой категории стал физический вакуум. Классическая (нерелятивистская) физика потратила немало усилий на разработку механической модели эфира, как особой светоносной среды, аналогичной твердому телу для звуковых волн. Распространение понятия протяженности на такую среду ведет к противоречию с известным фактом ее релятивистской инвариантности, ибо если бы эфир можно было представить как некоторую особую материю, то с нею можно было бы связать выделенную систему отсчета. Однако такая ситуация, как известно, противоречит теории относительности. В квантовой теории понятие физического вакуума приобрело качественно новый смысл.

## Кратко о физическом вакууме

Энергия  $E$  частицы в релятивистской области может быть найдена из выражения

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4,$$

где  $p$  – импульс частицы,  $m$  – ее масса,  $c$  – скорость света. Отсюда чисто математически следует, что

$$E = \pm (p^2 c^2 + m^2 c^4)^{1/2}.$$

В классической физике выражение со знаком минус не имело никакого смысла и просто отбрасывалось. Однако, как показал в 1928 г. П. Дирак, состояния с  $E > 0$  и  $E < 0$  совместно образуют полную совокупность состояний и пренебрегать областью  $E < 0$  нельзя.

П. Дирак первоначально предположил, что в основном состоянии системы свободных частиц, называемом «вакуумом», числа заполнения  $n$  равны нулю, т.е. на всех энергетических уровнях (где в случае их заполнения энергия частиц  $E > 0$ ) частицы отсутствуют. В то же время в этом состоянии имеется бесконечное число («море») одночастичных состояний, занятых, согласно принципу Паули, поодиночке электронами с отрицательной энергией, подобно электронам в валентной зоне полупроводника (если в собственном полупроводнике середину запрещенной зоны считать нулевым уровнем). Переход одного из таких электронов в состояние с  $E > 0$  (при получении им соответствующей энергии, разумеется) приводит к появлению "дырки" в совокупности состояний с отрицательной энергией. Эти «дырка» теперь обладает положительной энергией,

электрическим зарядом  $+e$ , спином равным спину электрона и называется античастицей по отношению к электрону или антиэлектроном, который впоследствии был назван позитроном. Позитрон экспериментально обнаружили в 1932 г.

Существуют «квантовые флуктуации» вакуумного состояния и его можно «поляризовать», как если бы безбрежное «море» частиц, находящихся в состоянии с отрицательной энергией, действительно существует. Это «море» не наблюдаемо, пока оно не возмущено, но оно может проявиться во вполне наблюдаемых эффектах, если на него подействовать внешними полями.

Вакуум электромагнитного поля – это пространство, в котором векторпотенциал  $A$  поля равен нулю. В квантовой электродинамике такое значение векторпотенциала рассматривается как нулевое число фотонов. Нулевое поле при отсутствии реальных фотонов существует в виде статистических флуктуаций – порождения и уничтожения виртуальных фотонов. Наличие у всех частиц квантовых свойств приводит к соответствующему вакууму с качественно одинаковыми характеристиками, отвечающими тому или другому виду материи. Дальнейшее изучение свойств физического вакуума потребовало учета так называемых виртуальных процессов.

Необходимость введения виртуальных процессов, например, в квантовой электродинамике, обусловлена в первую очередь эффективностью использования при представлении поля понятием фотона. Реальный фотон, как известно, излучается движущимся с ускорением зарядом. Но как тогда в рамках квантовых представлений



поля описывать взаимодействие покоящихся зарядов? Аналогичные противоречия возникают и в случае других полей.

Выход из этого был найден таким образом: квантам полей, фотонам в случае электромагнитного поля, пионам – в случае ядерного поля и т.д. было приписано особое виртуальное состояние. Действительные фотоны электрон может излучать, только находясь в движении, виртуальные же – находясь в покое. Таким образом, понятие виртуальной частицы возникло как определенная абстракция при описании в рамках квантового формализма. Однако следует отметить, что история науки содержит немало случаев, когда понятия, применяемые только для удобства при описании, в дальнейшем находили материальное подтверждение в экспериментах.

Виртуальное существование – это специфический вид реального объективного бытия. Его можно соотнести с существованием в действительности. Действительное и виртуальное суть противоположности, с необходимостью переходящие при определенных условиях друг в друга. Виртуальное существование – это бытие, возможное только в определенных связях. Так как все виды реального существования связаны между собой и переходят друг в друга, то, очевидно, что их нельзя изучать изолированно, а нужно изучать в их единстве. Виртуальное и обычное существование «элементарных» частиц неотделимы друг от друга. Виртуальные частицы – это определенные стадии в их объективных превращениях частиц друг в друга.

Так как частицы связаны между собой и обладают свойством взаимопревращаемости, можно сказать, что поскольку каждой

частице соответствует несколько полей, которые в своем основном состоянии входят в ее содержание, постольку структура частицы представляет собой совокупность ее связей с другими частицами и ВОЗМОЖНОСТЕЙ ее пре вращения в другие частицы. Квантами же основных состояний физических полей являются виртуальные частицы. Следовательно, можно сказать, что «элементами» структуры «элементарных» частиц являются виртуальные частицы, через которые и выражаются связи «элементарных» частиц между собой и полями, а также возможности их превращения друг в друга и в различные физические поля.

Вакуум не может быть отдельно существующей особой материей, это свойство физической неделимости мира, находящегося в основном состоянии. При этом возникновение частицы из вакуума означает повышение степени дифференцированности реальности за счет выделения частицы из вакуумного состояния соответственно затраченной энергии. Сообщение энергии переводит виртуальное состояние в действительное (или в реальное в узком смысле этого слова). Обратный процесс – «заполнение дырки» – спонтанный, что лежит в основе процесса стремления любой системы к минимуму энергии. Интересно, что современная концепция физического вакуума была «предсказана» в трудах древних китайских философов (Чжуан Цзы). «... великая пустота на может не содержать изначальное ЦИ. Изначальное ЦИ не может не собираться и не образовывать вещи. Все сущее не может не расплыться и создавать великую пустоту, которая находится в постоянном круговороте... Скопления изначального ЦИ расплываются по великой пустоте... Если иметь в виду, что великая пустота и есть существование изначального ЦИ, то, следовательно,

небытия не существует. Хотя великая пустота лишена формы, но она заполнена мельчайшими частицами изначального ЦИ, которое то вдруг собирается в одно место, то вдруг растекается по пространству, так что его изменениям нет предела». Существование – не существование материального ЦИ в пустоте, являющегося и частью пустоты, ее порождающим и ее порождением, есть не что иное, как сегодняшние виртуальные возмущения вакуума.

В заключение укажем на фундаментальную роль вакуума в ряде физических процессов, интерпретация которых в рамках традиционных представлений физики весьма затруднительна. Как, например, возбужденный атом, переходя в основное состояние, излучает квант электромагнитной энергии? Как в атоме «формируется» фотон, который будет впоследствии испущен? Здесь вакуум как квантовое свойство материального мира приводит к спонтанному переходу возбужденной системы в равновесное состояние. Энергия возбуждения атома передается виртуальному фотону, который при определенной ее величине переходит в реальное состояние.

Равномерное движение, как известно, является исключительно относительным и никакими физическими экспериментами установлено быть не может. Ускоренное же движение заряженного тела сопровождается излучением фотонов, что, очевидно, обусловлено формированием градиента поляризации вакуума. Следует полагать, что при равномерном движении заряда поляризация вакуума и его частичное экранирование остаются неизменными и постоянными на всем пути. Наличие ускорения есть причина различной степени дифференцированности частицы вдоль

траектории. В свою очередь свойство физической неделимости вакуума с учетом этого приводит к формированию «сопротивления вакуума», обусловленного ростом наведенного заряда. Энергия, затрачиваемая на увеличение заряда и, соответственно, на генерацию электронпозитронных пар путем их аннигиляции, превращается в фотоны. Таким образом, излучает не ускоренно движущийся заряд, а вакуум, неравномерно поляризованный ускоренно движущимся зарядом. Уменьшение длины волны де Бройля с ростом скорости, свидетельствующее о росте степени дифференцированности материи, и «сопротивление» вакуума этому процессу лежат в основе формирования инертной массы частицы и тела, как совокупности частиц.

Динамические свойства «реальной» материи определяются взаимодействием ее с вакуумом и регенерационным характером движения частиц, что обусловлено взаимодействием данной частицы с возникающими из вакуума виртуальными парами «частица античастица» (здесь возможно разрешение противоречий в апориях Зенона). Сама же «материя» вакуума метрически не определяется, т.е. пространственно-временной интервал, отражающий свойства множества, не существует. Физический вакуум не может существовать между объектами вещественного мира, он отражает свойство единства всего сущего.

## Квантово-механическое описание объектов микромира

Непосредственное перенесение макроскопических способов описания движения на объекты микромира привело к целому ряду парадоксов и противоречий с результатами эксперимента. Открытие волновых свойств потоков микрочастиц и осознание существенной роли процесса измерения в формировании «портрета» микросистемы с необходимостью поставили проблему создания нового «языка», на котором следует вести разговор с микромиром.

Как теоретически предсказать результаты эксперимента по определению той или иной физической характеристики микросистемы (энергии  $E$ , импульса  $\vec{p}$ , момента импульса  $\vec{L}$ , спина  $\vec{s}$ )? В квантовой теории каждой из этих величин ставится в соответствие оператор (оператор полной энергии  $\hat{E} = \hat{H}$ , операторы, соответственно,  $\hat{p}$ ,  $\hat{s}$ ,  $\hat{L}$ ). Физическая система (а говоря более точно, ее физическое состояние, определяемое  $E, \vec{p}, \vec{L}, \vec{s}$ ) «моделируется» волновой функцией  $\psi(E, \vec{p}, \vec{L}, \vec{s}, \vec{r}, t)$ . Сам же процесс измерения конкретной физической характеристики  $F$  (это может быть  $E$ ,  $\vec{L}$ ,  $\vec{s}$  или  $\vec{p}$ ), осуществляемый путем воздействия прибора на систему, в теории представлен действием оператора  $\hat{F}$  на волновую функцию  $\psi$ . Информация о значениях  $F$  получается из решения уравнения на собственные функции  $\psi$  и собственные значения  $F$  этого оператора  $\hat{F}\psi = F\psi$ . Совокупность собственных значений  $F_n$  полностью тождественна совокупности полученных в соответствующем эксперименте данных. Таким образом, решая уравнения  $\hat{E}\psi_E = E\psi_E$ ,  $\hat{L}\psi_L = L\psi_L$ ,  $\hat{p}\psi_p = p\psi_p$ , мы получаем статистическую информацию о величинах  $E, \vec{L}, \vec{p}$ .

Среднее значение  $\bar{F}$  величины  $F$ , представленной оператором  $\hat{F}$ , определяется из формулы

$$\bar{F} = \int \psi^*(r, t) \hat{F} \psi(r, t) dr.$$

Теперь более подробно рассмотрим роль процесса измерения при отображении человеком реальной действительности микромира. Описание на основе понятия относительности к средствам наблюдения дает гораздо более глубокую и тонкую объективную характеристику микрообъекта, чем это было возможно на основе идеализации классической физики. Такая характеристика, как уже говорилось выше, требует и более развитого математического аппарата теории линейных операторов, их собственных значений и собственных функций, теории групп и других математических понятий.

Приняв за источник наших суждений о свойствах объекта акт взаимодействия объекта с прибором и положив в основу описания явлений относительность к средствам наблюдения, мы вводим в описание атомного объекта (его состояние и поведение) существенно новый элемент – понятие вероятности, а тем самым и понятие потенциальной возможности. Необходимость рассматривать понятие вероятности именно как существенный элемент описания, а не как признак неполноты наших знаний, вытекает уже из того факта, что при данных внешних условиях результат взаимодействия объекта с прибором не является, вообще говоря, predetermined однозначно, а обладает лишь некоторой вероятностью. Серия таких взаимодействий приводит к статистике, соответствующей определенному распределению вероятностей. Это распределение

вероятностей отражает объективно существующие при данных условиях потенциальные возможности. Эта задача, как известно, решается на основе теории линейных операторов и их собственных функций. Понятие собственной функции оператора приводит к более общему понятию волновой функции, зависящей от времени и описывающей свойства данной физической системе при данных условиях потенциальные возможности. Волновая функция удовлетворяет дифференциальному уравнению, вид которого непосредственно связан с видом оператора полной энергии системы. Дифференциальное уравнение для волновой функции первого порядка по времени и поэтому волновая функция однозначно определяется своим начальным значением. Н. Бор, В. Гейзенберг, В. Паули и др., ставя во главу угла последствия взаимодействия частицы с прибором, неразрывно связывают волновую функцию с процессом измерения. То есть движущийся электрон не обладает до взаимодействия его с прибором состоянием определенного типа: измерением экспериментатор как бы вынуждает электрон перейти в состояние с определенным импульсом, уничтожая вместе с тем его прежнее состояние с определенной координатой (полученной в предыдущем эксперименте).

В.А. Фок в своих рассуждениях исходит из придания объективного характера потенциальным возможностям взаимодействия атомных частиц с окружающим миром и измерительным прибором, в частности. Кроме того, специфика микромира такова, что нельзя в принципе провести грань между тем, что мы называем частицей, и окружающим миром, с которым она взаимодействует (или частью которого она является). Волновая

функция в этом случае отражает не статистическую сущность набора состояний, а вероятностный процесс, отражающий возможность взаимодействия частиц с экспериментальными устройствами. Под потенциальными возможностями В.А. Фок понимает ВОЗМОЖНОСТИ, которые возникают и исчезают в процессе взаимодействия частиц с окружающим миром. То есть при взаимодействии квантового объекта с измерительным устройством происходит не только реализация имеющихся до измерения возможностей, но и возникновение новых, связанных с самим процессом взаимодействия.

Еще раз рассмотрим прохождение электронов через две щели в экране. Для этого в предыдущем эксперименте за щелями  $A$  и  $B$  поместим источник света  $I$ , посылающий фотоны в зоны возможного движения электронов (Рис. 1). Если электрон прошел, например, через щель  $A$ , то отраженный от него фотон регистрируется датчиком  $D1$ . Такая же ситуация имеет место в случае прохождения электрона через щель  $B$ . Здесь отраженный фотон регистрируется датчиком  $D2$ . Если источник света  $I$  выключен и обе щели открыты, то мы получаем известную картину интерференции 1. Если источник света  $I$  выключен и мы поочередно открываем и закрываем щели  $A$  и  $B$  (при этом мы знаем, через какую из щелей проходили электроны), то мы получаем также известную картину 2. Пусть теперь обе щели  $A$  и  $B$  будут открыты, но при этом включим источник света  $I$  (то есть у нас будет информация о том, через какую из щелей прошел электрон), то в этом случае получается картина 3, совершенно аналогичная картине 2.



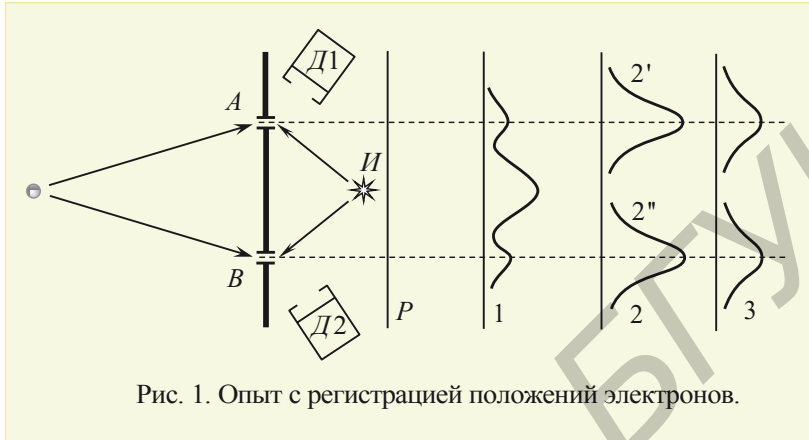


Рис. 1. Опыт с регистрацией положений электронов.

Почему же при одновременно открытых щелях  $A$  и  $B$  в последнем случае не формируется интерференционная картина, аналогичная картине 1? Дело в том, что процесс регистрации электрона у щели  $A$  или  $B$  путем зондирования его фотоном есть по сути дела определение его координаты, которая приводит к появлению неопределенности импульса. Следовательно, фаза волновой функции электрона, прошедшего через эту щель, изменится, в результате чего нарушится условие когерентности волн и интерференции не будет. Возмущающее действие прибора, связанное с получением информации о месте нахождения электрона, приводит к разрушению интерференции и получению суммы отдельных распределений 3.

В 1991 г. профессор Л. Мандел с сотрудниками из Рочестерского университета поставили эксперимент, в котором можно было получить информацию о пути следования фотона, не прибегая к прямому воздействию на него (в этом эксперименте в качестве исследуемых частиц были взяты фотоны, как наиболее удобные с

точки зрения их регистрации). Этот эксперимент основан на использовании специального преобразователя, позволяющего «расщепить» фотон на два других фотона, энергия каждого из которых в два раза меньше исходного.

Излученные лазером фотоны проходят через светоделитель и зеркалами направляются на преобразователи ПР1 и ПР2, каждый из которых расщепляет падающий на него фотон на два других (Рис. 2).

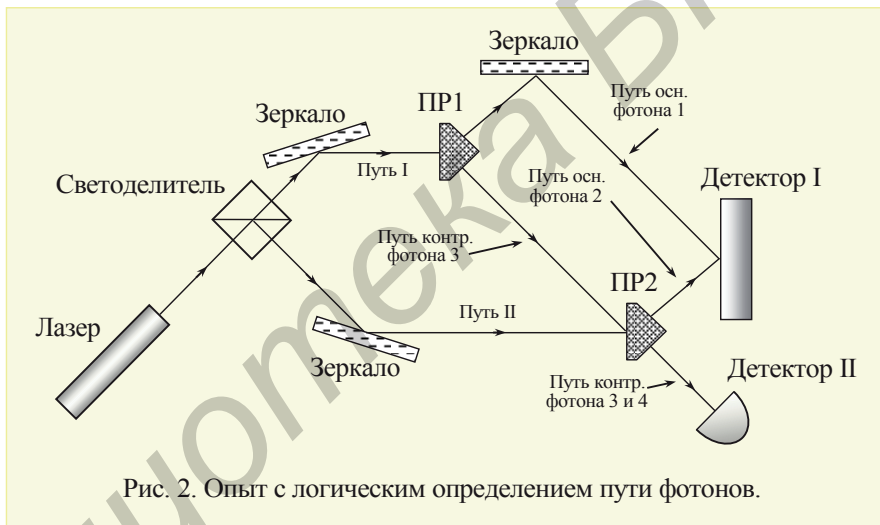


Рис. 2. Опыт с логическим определением пути фотонов.

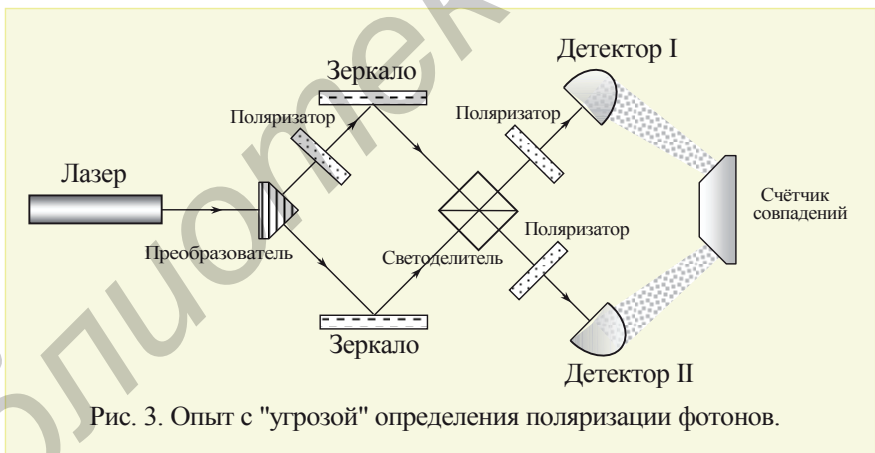
Интерференция основных фотонов 1 и 2 на детекторе I дает соответственно интерференционную картину. Очевидно, что с помощью этого детектора невозможно определить, по какому из путей (I или II) распространяется исходный фотон. Следовательно, необходимо предположить, что основной фотон шел по обоим маршрутам одновременно и после расщепления на преобразователях дал интерференционную картину на детекторе I. Для бесконтактного

получения информации о пути прохождения фотонов сформированы контрольные фотоны 3 и 4, идущие по пути, указанном на рисунке. Действительно, никоим образом не влияя на состояние основных фотонов 1 и 2, интерферирующих на детекторе I, мы тем не менее можем указать, по какому пути (I или II) распространялся фотон. Для этого перекроем путь контрольного фотона 3 (штриховая линия). Тогда при одновременном детектировании фотонов детекторами I и II (по схеме совпадений) мы будем точно знать, что оба фотона образовались от фотона, шедшего по пути II. При несовпадении отсчетов мы будем точно знать, что оба фотона образовались от фотона, идущего по пути I.

Однако самое удивительное в этом эксперименте заключается в том, что как только мы узнаем о конкретном пути распространения фотона, интерференционная картина исчезает. Фактом является то, что лишь наличие информации при полном отсутствии вмешательства в судьбу интерферирующих фотонов разрушает их волновое поведение.

Как выяснил Л. Мандел, одна лишь «угроза» узнать, по какому пути прошел фотон, приводит к мгновенному коллапсу (редукции) волновой функции и «превращению» его в «частицу». Такой эксперимент был поставлен в 1992 г. профессором Р. Чао из Калифорнийского университета в Беркли (Рис. 3). Два одинаково поляризованных фотона, вышедшие из преобразователя ПР, направляются на светоделитель и проходят к детекторам, которые совместно со счетчиком совпадений регистрируют интерференционную картину. Это свидетельствует о том, что каждый фотон шел до светоделителя одновременно по двум путям как волна.

Если поместить на пути одного фотона устройство поворота плоскости поляризации, то, располагая соответствующие индикаторы поляризации перед детектором, можно однозначно определить, по какому из путей шел фотон. При этом, как уже можно догадаться, интерференционная картина разрушается. Но самое удивительное состоит в том, что, изменив плоскость поляризации, но не анализируя поляризации фотонов перед детекторами (то есть не помещая туда указанных выше индикаторов), мы интерференционной картины все равно не увидим. Можно, таким образом, утверждать, что, создав лишь «угрозу» получить «разоблачающую» информацию, мы приводим к редукции волновой функции и, соответственно, к «превращению» волны в фотон, идущий по конкретному пути.



Если поместить перед детекторами два поляризационных фильтра, которые пропускают одинаково поляризованные фотоны, то

интерференционная картина снова восстанавливается. Таким образом мы восстановили редуцированную (или предварительно уничтоженную за счет введения устройства поворота плоскости поляризации) волновую функцию.

Р. Чао не остановился на этом удивительном явлении (ведь редукция волновой функции считалась необратимым процессом) и поставил следующий эксперимент, в котором вместо поляризационных фильтров перед детектором были помещены поляризационные светоделители, которые направляли фотон с разной поляризацией к разным детекторам. Информация о времени прибытия одинаково поляризованных фотонов накапливалась в одном файле компьютера, а информация о времени прибытия других фотонов – в другом файле. Для двух групп фотонов, обладающих различной поляризацией, наблюдаются две четкие интерференционные картины. Если же рассмотреть картину для всех вместе фотонов, то интерференционная картина не обнаруживается. Таким образом, процесс разрушения интерференционной картины (редукция волновой функции) можно проводить уже после попадания фотонов в детекторы (путем лишь логического рассуждения). Следует отметить, что эти рассуждения могут быть результатом излишней идеализации фотона, реальность которого (как самостоятельной сущности) находится под большим вопросом.

## Реальность виртуальных состояний

Из рассмотренных экспериментов с очевидностью следует, что проблему движения в микромире нельзя решить, прибегая к традиционным понятиям волны или частицы, как это зачастую делается. Это настолько рафинированные из окружающего нас макромира категории, что их непосредственное использование приводит к парадоксам и недоразумениям. Во первых, любая микрочастица не может быть физически выделена из окружающего ее и взаимодействующего с ней мира. Поэтому представление об абсолютно отдельной частице на уровне взаимодействия, соответствующего ситуации когда  $S \sim h$  ( $S$  – действие,  $h$  постоянная Планка), является результатом идеализации, которая связана с нашим традиционным образом мышления. Динамические закономерности, характерные при описании движения материальных объектов в нашем мире, принципиально неприменимы там, где взаимодействие «размазывает» частицу и понятия массы, заряда и др. начинают носить фиктивный характер. То, что мы определяем в эксперименте, есть полная суммарная масса и заряд частиц, и лишь стремление свести все к нашим традиционным представлениям заставляет подразделять наблюдаемое на части, обусловленные якобы «собственными» характеристиками и взаимодействием.

Невозможность разложить реальность на индивидуальные элементы предполагает в понятие «реальность» включить потенциально возможное (как предложил В.А. Фок), то есть определенным образом связанную совокупность ВИРТУАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ, КОТОРЫЕ ПРИ НАЛОЖЕНИИ ОПРЕДЕЛЕННОГО СИЛОВОГО ПОЛЯ ИЛИ ИНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗАТРАТ

МОГУТ ОКАЗАТЬСЯ ОСУЩЕСТВИВШИМИСЯ. Таким образом, истинная реальность есть реальность, дополненная миром виртуальных состояний. Неразложимость на субквантовом уровне, то есть свойство мира как единого по своей сущности объекта, свидетельствует о том, что эти виртуальные состояния имеют объективную природу. Следует отметить, что переход из виртуального состояния (это потенциально возможное состояние) в реальное не может происходить непрерывно (ведь реальное и виртуальное диалектически противоречивы, и не может быть чего-то немножко реального или немножко потенциального), а здесь имеет место скачкообразное явление.

Свойство мира как единого кванта отражает также известное условие нормировки волновой функции, из которого следует достаточно разумное объяснение ее редукции. Эта проблема происходит из принципа суперпозиции, согласно которому до реального измерения, устанавливающего определенное значение переменной, волновая функция  $\psi$  представляет собой сумму частных состояний  $\psi_n$ , каждое из которых может быть реализовано со своей вероятностью  $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ . Причем каждое из этих состояний является не менее и не более реальным, чем любое другое. После измерения реализуется какое-то состояние  $\psi_n$ , причем все остальные состояния становятся нулевыми. Состояние же  $\psi_n$  реализуется с определенной вероятностью  $w_n = |c_n|^2$ . Следует отметить, что это «стягивание» (или редукция  $\psi \rightarrow \psi_n$ ) происходит мгновенно, с бесконечной скоростью. Такие нелепые с точки зрения здравого смысла выводы квантовой физики могут быть поняты, если в основу рассуждений положить концепцию мира, которая предполагает

реальность, состоящую из действительных (то есть определенных) и виртуальных состояний. Весь возможный набор виртуальных состояний представлен суперпозицией частных состояний волновой функции. В связи с неразложимостью единого квантового состояния мира МЕЖДУ ЭТИМИ ВИРТУАЛЬНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ СУЩЕСТВУЕТ ПОЛНАЯ КОРРЕЛЯЦИЯ, представленная нормировкой волновой функции  $\psi$  (это, как указывалось выше, и есть условие неразложимости). Любое воздействие, связанное с переносом хотя бы одного кванта действия, приведет к скачкообразному переходу из вакуума виртуальных состояний (который описывается волновой функцией  $\psi$ ) в состояние  $\psi_n$  с определенным значением измеряемой величины, и тогда вся совокупность виртуальных состояний одновременно исчезает. Таким образом, квантовое свойство мира, как единого целого, обеспечивает полную корреляцию потенциальных возможностей и является причиной перераспределения виртуальных состояний в зависимости от фактически реализующихся.

Непротиворечивое описание движения микрочастиц возможно с привлечением понятия вакуума как совокупности виртуальных состояний, дополняющих неполный «огрубленный» нашим традиционным мышлением ее образ. Теперь движение связано с так называемыми трансмутациями, представляющими периодический переход из виртуального состояния в реальное и наоборот. Следует отметить, что речь идет не о движении по неделимым ячейкам пространства, а о постоянно происходящем процессе взаимодействия частицы с вакуумом, представляющим в данном случае скоррелированную в пространстве совокупность ее (этой частицы)



виртуальных состояний. Математически смоделировать такое периодическое явление можно с помощью некоторого волнового процесса, который сам по себе не имеет физического (в привычном нам понятии) смысла. То есть такой волны, распространяющейся в пространстве и времени, как это, например, имеет место для звука в твердом теле или газе, не существует. Волна  $\psi(r, t)$  описывает распределение виртуальных состояний частицы и их согласованность в пространстве и времени.

В рамках такого подхода частица может быть в самом общем случае представлена как некая сущность (которую мы определяем в эксперименте), дополненная совокупностью своих же виртуальных состояний.

Прохождение такого объекта через две щели (Рис. 1) – процесс гораздо более сложный, чем это представляется в рамках классических моделей, описываемых, как известно, динамическими законами. На щелях имеет место дифракция волнового процесса, связанного с периодическими переходами из реального в виртуальное состояние и наоборот. За щелями происходит интерференция виртуальных состояний и максимум есть не что иное как область перехода виртуального состояния в реальное. Самое существенное здесь то, что физическая неделимость состояния частицы (реальное + виртуальное), во-первых, обуславливает когерентность прошедших «волн», а во-вторых, обеспечивает редукцию волнового состояния в реальную частицу.

Об этом свидетельствуют также результаты вышерассмотренных экспериментов. Здесь очевидно, что между всеми частями

электромагнитного поля (или, говоря другим языком, между квантами), распределенными в пространстве, существует жесткая связь и вмешательство в любой участок этой "конструкции" приводит к нарушениям его единого, неделимого и целого состояния, что, в свою очередь, является причиной уничтожения интерференционной картины.

Понятие о виртуальных состояниях и их взаимодействии весьма продуктивно может быть использовано при описании критических явлений вблизи точек фазовых переходов.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Ансельм А. И. Основы статистической физики и термодинамики. – М.: Наука, 1973.
2. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. – М.: Наука, 1976.
3. Квасов Н. Т. Загадка движения (Мир и его описание человеком) // Человек. Общество, Мир, 1997, №7, с.92-112.
4. Квасов Н. Т. Лекции по физике. – Минск.: БГУИР, 2006.
5. Киттель Ч. Статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1977.
6. Савельев И. В. Курс общей физики: В 3 т. – М.: Наука, 1987.
7. Суханов А. Д. Лекции по квантовой физике. – М.: Высш. шк., 1991.
8. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике: В 9 ч. – М.: Мир, 1976.
9. Шпольский Э. В. Атомная физика: В 2 т. – М.: Наука, 1974.

Библиотека БГУИР

Библиотека БГУИР

Люблю **книги**  
ljubljuknigi.ru



yes  
**I want more books!**

Покупайте Ваши книги быстро и без посредников он-лайн - в одном из самых быстрорастущих книжных он-лайн магазинов!  
Мы используем экологически безопасную технологию "Печать-на-Заказ".

Покупайте Ваши книги на  
**[www.ljubljuknigi.ru](http://www.ljubljuknigi.ru)**

Buy your books fast and straightforward online - at one of the world's fastest growing online book stores! Environmentally sound due to Print-on-Demand technologies.

Buy your books online at  
**[www.ljubljuknigi.ru](http://www.ljubljuknigi.ru)**

OmniScriptum Marketing DEU GmbH  
Heinrich-Böcking-Str. 6-8  
D - 66121 Saarbrücken  
Telefax: +49 681 93 81 567-9

info@omniscrptum.com  
www.omniscrptum.com

OMNI Scriptum



Библиотека БГУИР

Библиотека БГУИР



Библиотека БГУИР