

Нелинейная лазерная спектроскопия.

Крылов Игорь Ратмирович.

Введение.

Физический факультет СПбГУ, комната Б101, раб. тел.: (812-)428-44-66,
<http://igor-krylov.ru/> — интернет страница,
<http://igor-krylov.narod.ru/> — интернет страница с назойливой рекламой,
igor-krylov@yandex.ru — электронная почта.

В конце семестра — экзамен; вход-выход свободный; вопросы, замечания, возражения — по ходу лекции.

Литература.

1. Летохов В. С., Чеботаев В. П. Принципы нелинейной лазерной спектроскопии, — М.: Наука, 1975, 280с.
2. Летохов В. С., Чеботаев В. П. Нелинейная спектроскопия сверхвысокого разрешения, — М.: Наука, 1990, 512с.
3. Попов А. К. Введение в нелинейную спектроскопию, — Новосибирск: Наука, 1983, 274с.
4. Раутиан С. Г., Смирнов Г. П., Шалагин А. М. Нелинейные резонансы в спектрах атомов и молекул, — Новосибирск, Наука, 1979, 311с.
5. Под ред. Дж. Стейнфелда. Лазерная и когерентная спектроскопия, — М.: Мир, 1982, 632с.
6. Аллен Л., Эберли Дж. Оптический резонанс и двухуровневые атомы, — М.: Мир, 1978, 224с.

Отличие от нелинейной оптики — нелинейная лазерная спектроскопия рассматривает явления в разреженных средах, в газах низкого давления, а нелинейная оптика — явления в оптически плотных средах.

Актуальность.

1. Спектры сверхвысокого разрешения для развития приближенных методов решения квантовомеханических задач.
2. Оптические эталоны и реперы частоты и длины.
3. Стабилизация частоты генерации лазера и получение стабильного источника света.
4. Исследование межатомных и межмолекулярных взаимодействий по форме стационарных и нестационарных сигналов.
5. Красивые эффекты, подтверждающие квантовую механику.

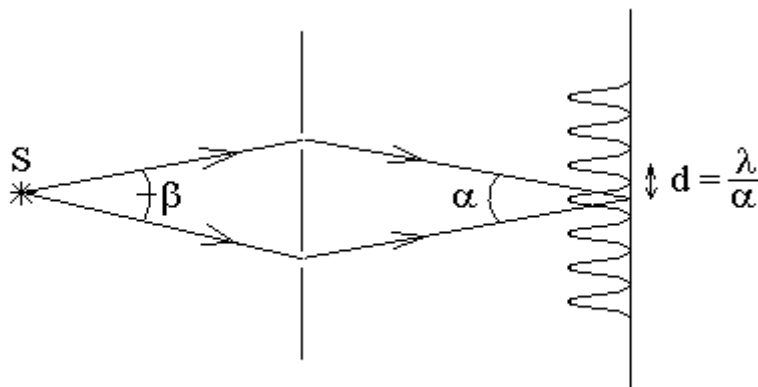
Формализм и ограничения.

Квазиклассическое или полуклассическое приближение, которое состоит в квантовом описании вещества и классическом описании светового поля без вторичного квантования, без квантования поля.

Кое-что о квантовой механике.

Дифракция и интерференция электронов.

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



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

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

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

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

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

А нельзя ли хотя бы мысленно за одним из отверстий поставить датчик, который будет регистрировать электрическое поле, пролетающего рядом с

датчиком электрона? Можно. Электроны при этом пролетают то через одно, то через другое отверстие, а интерференционная картина отсутствует, так как мы точно знаем, через какое отверстие пролетает каждый электрон.

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

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

Интерференция более тяжелых частиц. Отражение молекулярного пучка поверхностью кристалла.

Аналогично интерференции электронов на двух отверстиях можно рассмотреть интерференцию протонов на тех же отверстиях. Ширина интерференционных полос равна $d = \frac{\lambda}{\alpha}$, где α — угол, под которым

интерферирующие волны сходятся на экране, $\lambda = \frac{h}{mV}$ — длина волны де

Бройля, m — масса частицы, V — ее скорость. Заметим, что масса протона почти в две тысячи раз больше массы электрона. При прочих равных условия интерференционные полосы для протонов будут в эти же две тысячи раз уже, чем для электронов. Рассмотреть, такую интерференционную картину будет очень трудно.

Чтобы наблюдать интерференцию протонов, они должны иметь в тысячи раз меньшую скорость по сравнению с электронами. Температура квадратично зависит от скорости, то есть протоны должны иметь в миллионы раз меньшую эффективную температуру, чем электроны, для наблюдения той же интерференционной картины.

Наблюдать интерференционную картину трудно, но можно. При малых потоках протонов интерференционная картина сохраняется. Следовательно, каждый протон интерферирует сам с собой, и пролетает через два отверстия в экране.

Аналогично можно наблюдать интерференцию атомов или молекул. Так известны опыты по наблюдению рассеяния молекулярного пучка кристаллом. Молекулярный пучок отражается от поверхности кристалла не зеркально, а имеет характерные дифракционные максимумы.

В соответствии с квантовой механикой должны интерферировать и молекулярные кластеры — группы молекул. Но практическому наблюдению такая интерференция пока не поддается из-за технических трудностей.

Аналогично должны интерферировать мячики, кошки и люди.

Как для самого человека выглядит то, что он пролетает через две двери и интерферирует сам с собой? Никак не выглядит. Свет нужно погасить, так как для сохранения интерференции, нельзя подсматривать за процессом пролета

через двери. Заметим, что у человека масса еще больше, чем у протона, в результате для наблюдения интерференции потребуются бросать человека с такой малой скоростью, что один пролет через две двери потребует времени в 10^{15} больше времени существования Вселенной.

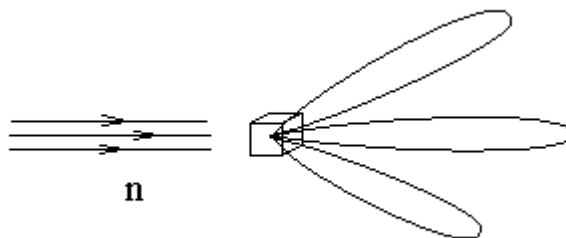
Эффект Ааронова — Бома.

В эксперименте по интерференции электронов на двух щелях между щелями помести соленоид с осью перпендикулярной рисунку. Магнитное поле будет только внутри соленоида, если он достаточно длинный. Электроны пролетают в области, где нет магнитного поля. Изменяя величину магнитного поля в соленоиде, можно сдвигать интерференционные полосы. Интерференционные полосы сдвигаются векторным потенциалом, а не напряженностью магнитного поля.

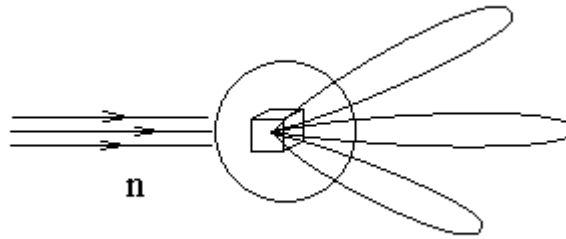
Рассеяние нейтронов на кристалле.

Для интерференции необходимо, чтобы не было принципиальной возможности подсмотреть за процессом. Как это нужно понимать видно из следующего примера.

Есть эксперименты по рассеянию пучка нейтронов на кристалле. Если у ядер атомов кристалла нет спина, то нейтроны рассеиваются всем кристаллом, как объемной дифракционной решеткой. В диаграмме направленности рассеянных электронов образуются дифракционные максимумы для выделенных направлений.



Однако иногда в рассеянии нейтронов кроме острых дифракционных максимумов присутствует слабое равномерное рассеяние по всем направлениям. Для объяснения этого результата рассмотрим рассеяние нейтронов на кристалле, ядра атомов которого имеют половинный спин. Нейтрон тоже имеет половинный спин. При рассеянии ядро и нейтрон могут поменяться спинами. В таком случае рассеяние происходит не на всем кристалле, а на ядре одного атома. Рассеяние на точечном объекте имеет практически одинаковую вероятность рассеяния в любом направлении. В результате к диаграмме рассеяния с острыми максимумами (без изменения спина ядра) добавляется диаграмма рассеяния на точечном объекте.



Заметим, что при этом не важно, пытаемся ли мы определить, у какого ядра изменился спин, важно только, что это принципиально возможно. Точнее, то, что появляется слагаемое с равномерным рассеянием по всем направлениям, означает, что обнаружить ядро атома, на котором произошло рассеяние нейтрона с поворотом спина ядра, принципиально возможно.

Кошка в черном ящике (кот Шредингера).

Рассмотрим мысленный опыт.

Пусть в нашем распоряжении есть абсолютно черный ящик, который обладает тем свойством, что из него наружу не поступает абсолютно никакая информация. Пусть в этот ящик помещена живая кошка. Кроме кошки в ящик помещают взрывное устройство с некоторым спусковым механизмом. Спусковой механизм включается с помощью радиоактивного элемента, испускающего α -частицы, которые регистрируются приемником α -частиц. Электронная схема приемника включает взрывное устройство. Взрывное устройство и живую кошку закрывают в черном ящике.

Через некоторое время ящик хотят открыть. Пусть за это время счетчик α -частиц должен был сработать с вероятностью $1/2$. Тогда с вероятностью $1/2$ в ящике находится живая довольная жизнью кошка, и с вероятностью $1/2$ кошка мертва, да так мертва, что от нее практически ничего не осталось. Если из ящика принципиально не выходит никакой информации, то в соответствии с общепризнанной копенгагенской интерпретацией кошка внутри ящика перед его открытием находится в суперпозиционном состоянии живой и дохлой кошки. Макроскопические кубиты могут же находиться в суперпозиционном состоянии.

Спрашивается, как это выглядит с точки зрения самой кошки?

С точки зрения спонтанной редукции Гирарди, Римини и Вебера (ГРВ) кошка — макроскопический объект и поэтому находится в одном из двух состояний, и никакой проблемы нет. Вероятность спонтанной редукции в единицу времени $\frac{N}{\tau}$, где N — число взаимодействующих частиц, τ —

универсальная константа $\tau \approx 10^{15}$ сек.

Проблема кошки в черном ящике соприкасается с проблемой необходимости макроскопического прибора для квантовых измерений.

Хью Эверетт, Стивен Вайнберг. Параллельные Вселенные.

Где проходит граница размера прибора, при котором прибор становится макроскопическим? Согласно Хью Эверетту такой границы нет, не бывает никакого измерения квантового объекта с помощью макроскопического прибора, квантовый объект всегда остается в суперпозиционном состоянии, в результате вся Вселенная оказывается в суперпозиционном состоянии с одной волновой функцией. Такой же точки зрения придерживается, в частности, Стивен Вайнберг — один из лауреатов нобелевской премии 1979 года за объединение электрического и слабого взаимодействий в электрослабое взаимодействие. Если прибор вместе с наблюдателем оказываются внутри квантовой системы описываемой волновой функцией, то согласно Эверетту внутренний наблюдатель не может видеть своего суперпозиционного состояния, поэтому наблюдатель видит только одну реализацию. Так если бы кошка из предыдущих рассуждений оказалась в суперпозиционном состоянии живой и дохлой кошки, то сама кошка воспринимала бы себя в одном из этих двух состояний, а суперпозицию состояний кошки может обнаружить только внешний наблюдатель. С точки зрения внешнего наблюдателя внутренний наблюдатель (кошка) и измеряемый квантовый объект находятся сразу во всех возможных состояниях. Воспринимаемое нами, как внутренним наблюдателем, состояние любого прибора в этом смысле субъективно. Тогда с нашей субъективной точки зрения где-то в "параллельной Вселенной" реализуется другое состояние прибора и объекта, которые нужны для правильного суперпозиционного описания явления только внешнему наблюдателю.

Парадокс Эйнштейна, Подольского, Розена (ЭПР). Перепутанные состояния. Точное измерение импульса и координаты.

Первая часть парадокса морально устарела и парадоксом не является. Смысл первой части состоит в следующем. Пусть, например, при распаде частицы с нулевым импульсом на две части образуются две частицы с неизвестными импульсами. Измерим для первой частицы импульс, а для второй — координату. Производя измерение некоторой проекции импульса p_x первой частицы, мы автоматически узнаем значение проекции импульса p_x второй частицы, не измеряя его. Тогда, измеряя положение x второй частицы, мы одновременно узнаем для нее проекцию импульса и координату, что противоречит соотношению неопределенности Гейзенберга $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$.

Решение первой части парадокса состоит в том, что измерение проекции импульса первой частицы и измерение координаты второй частицы невозможно выполнить одновременно. Эта невозможность определяется другим соотношением неопределенности Гейзенберга $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$. Если же мы признаем, что измерения проекции импульса первой частицы и координаты второй были произведены последовательно, а не одновременно, то никакого противоречия с соотношением неопределенности $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ для

одновременного измерения Δx и Δp_x не будет. Поочередно величины Δx и Δp_x можно измерять с любой точностью.

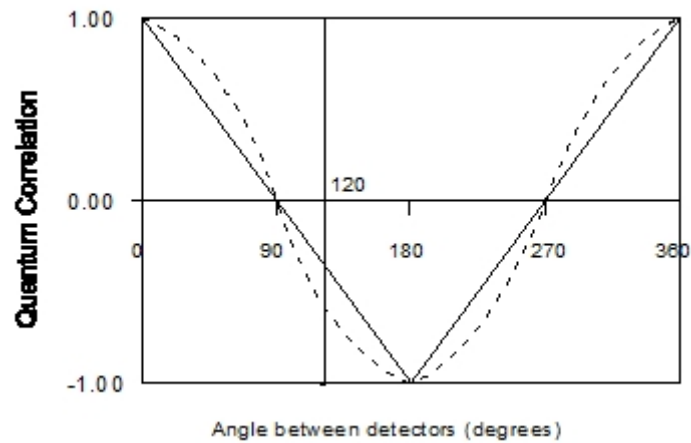
Вторая часть парадокса ЭПР связана с проблемой локальности квантовых объектов. Могут ли разные части объекта, находящегося в суперпозиционном состоянии, в то же время располагаться на сколь угодно большом расстоянии друг от друга? Копенгагенская интерпретация — да. Статистическая трактовка — нет. В копенгагенской интерпретации (сегодня это общепризнанная интерпретация квантовой механики) два объекта на большом расстоянии могут описываться общей волновой функцией — это так называемые перепутанные (спутанные) состояния. При этом измерения над одним объектом приводят к коллапсу волновой функции одновременно для обоих объектов независимо от расстояния между ними. В статистической трактовке два объекта разлетаются, и каждый из объектов описывается своей волновой функцией. Измерение, проведенное над одним объектом, приводит к коллапсу только его волновой функции, оставляя волновую функцию другого объекта неизменной.

Рассмотрим в качестве примера мысленный опыт рассеяния электрона на атоме. Пусть электрон имеет энергию достаточную для возбуждения атома. В результате рассеяния электрона атом может возбудиться, а может и не возбудиться. После рассеяния электрона атом находится в суперпозиционном состоянии одновременно возбужденном и невозбужденном. Рассеянный электрон одновременно имеет две энергии, разность которых равна энергии возбуждения атома. Это копенгагенская трактовка. При этом электрон и атом находятся в так называемом перепутанном состоянии, как две части системы, находящейся в одном квантовом состоянии.

Статистическая интерпретация — атом находится в одном состоянии, а мы просто не знаем в каком именно. Трудности статистической интерпретации состоят в том, что непонятно, на каком расстоянии и в результате чего, две части квантового объекта переходят из суперпозиционного состояния в одно из возможных чистых состояний.

Если продолжить копенгагенскую трактовку, то, как только атом обнаруживается в одном из двух состояний, например, в возбужденном состоянии, так сразу электрон оказывается в соответствующем состоянии, в состоянии с меньшей энергией. Это происходит мгновенно даже тогда, когда электрон и атом оказываются на очень большом расстоянии друг от друга. Как будто информация о состоянии атома передается электрону со скоростью больше скорости света. На самом деле, то, что передается, не является информацией. С помощью такой информации от атома к электрону невозможно передать, например, разведывательные данные о военных планах противника.

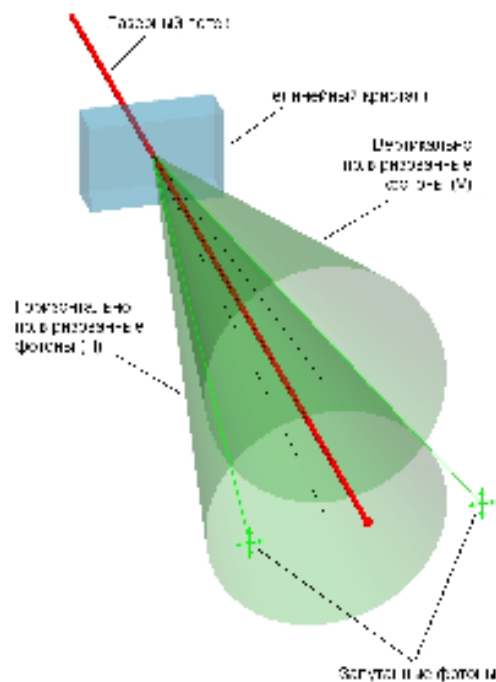
Опыты Штерна — Герлаха. Распад частицы с нулевым спином на две частицы со спином 1/2.



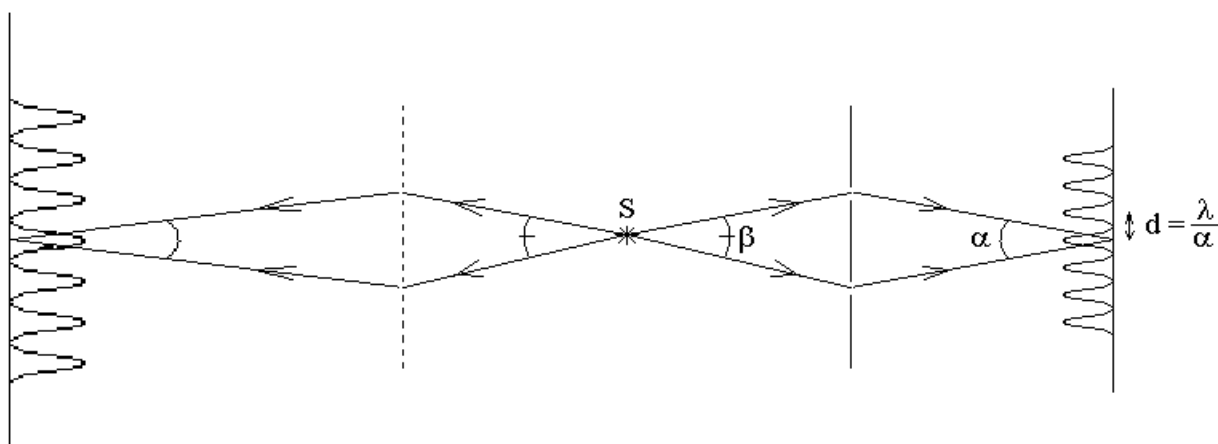
Локальный реализм — сплошная линия, перепутанные состояния — пунктирная. На основе неравенства графиков сформулированы неравенства Белла. Локальный реализм в предположении, что излучаются частицы с противоположными спинами на направление, которое каким-то образом совпадает с направлением измерения проекции первого, например правого, прибора Штерна — Герлаха, или со средним направлением двух приборов правого и левого.

Перепутанные состояния фотонов.

Генерация пары перепутанных фотонов в результате спонтанного параметрического рассеяния на нелинейном кристалле.



Один фотон пролетает через две щели, а для второго фотона наблюдается интерференционная картина.



Квантовая коммуникация быстрее скорости света.

Википедия -> Квантовая запутанность -> Квантовая коммуникация.

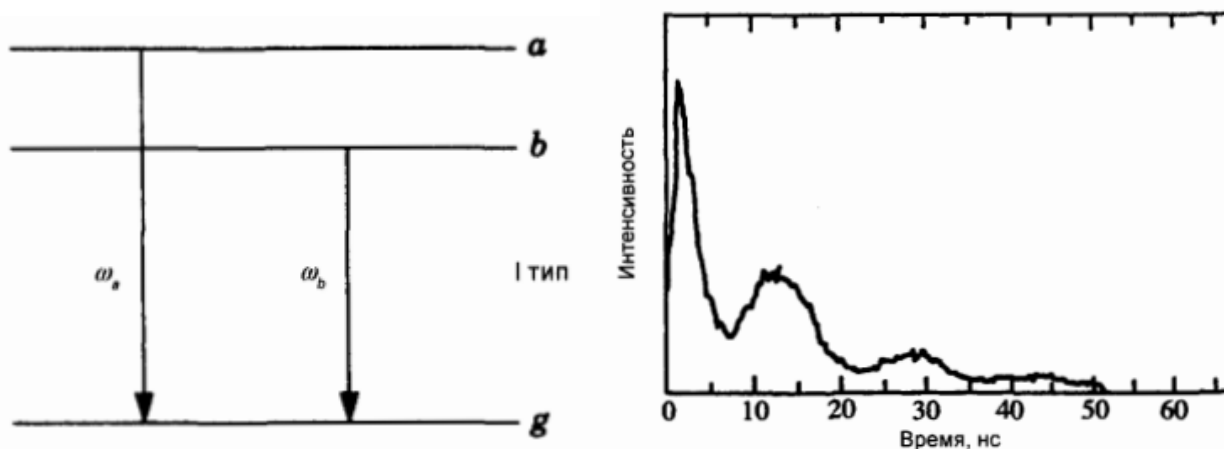
Два перепутанных кота Шредингера, перепутанных так, что если один мертв, то другой жив. Можно приоткрыть крышку одного ящика, и, если подсмотренная волновая функция не устраивает, то закрыть крышку обратно так, что восстановить суперпозиционное состояние кота. Можно приоткрывать крышку до тех пор, пока не появится нужное состояние.

Korotkov A. N., Jordan A. N. Undoing a Weak Quantum Measurement of a Solid-State Qubit // Physical Review Letters. 2006. Т.97, Iss.16. — doi:10.1103/PhysRevLett.97.166805.

Можно сформировать нужное состояние, а у перепутанного кота на любом удалении мгновенно получится противоположное состояние. Таким образом можно предать информацию на любое расстояние с бесконечной скоростью.

Квантовые биения с расщепленным верхним уровнем. Отсутствие квантовых биений с расщепленным нижним уровнем. Квантовые биения с расщепленным нижним уровнем.

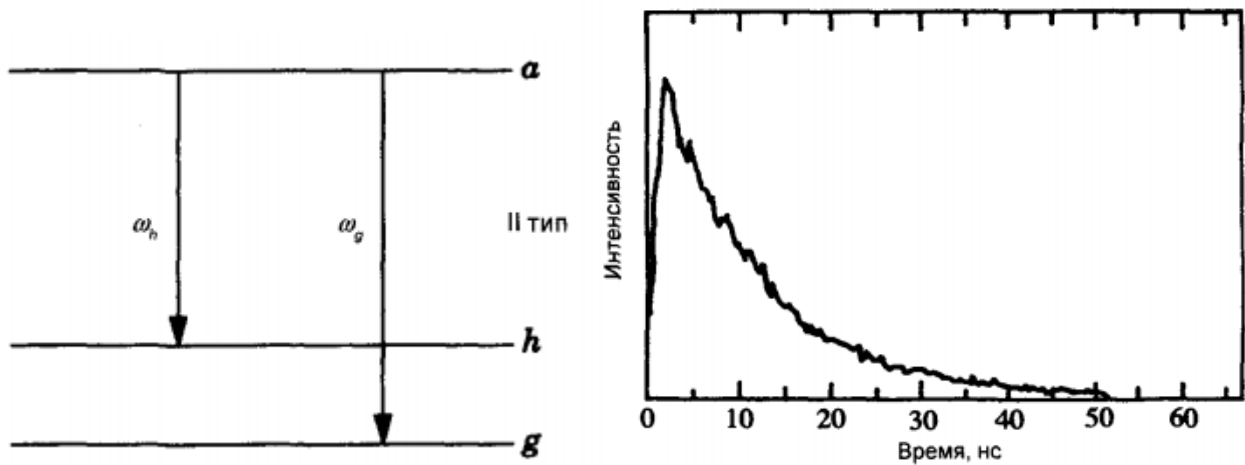
Расщепленный верхний уровень.



Е. Б. Александров «Биения в люминесценции при импульсном возбуждении когерентных состояний» // Оптика и спектроскопия. 1964. Т. 17. С. 957–960.

Е. Б. Александров «Оптические проявления интерференции невырожденных атомных состояний» // Успехи физических наук. 1972. Т. 107. С. 595–622.

Расщепленный нижний уровень — квантовых биений нет.

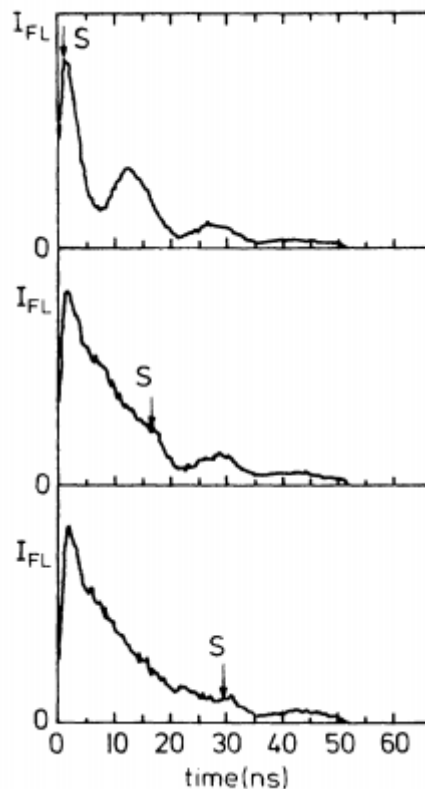


Но, если несколько изменить условия эксперимента, квантовые биения с расщепленным нижним уровнем энергии наблюдаются.

Дж. Гринштейн, А. Зайонц. Квантовый вызов. Современные исследования оснований квантовой механики. Изд. дом Интеллект 2008г. С.246-249.

Hellmuth T., Walther H., Zajonc A. and Schleich W. Delayed-choice experiments in quantum interference // Phys. Rev. A. V.35. No.6. P.2532-2541. 1987.

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_g + e^{i\theta}\psi_h) \quad \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_g - e^{i\theta}\psi_h)$$



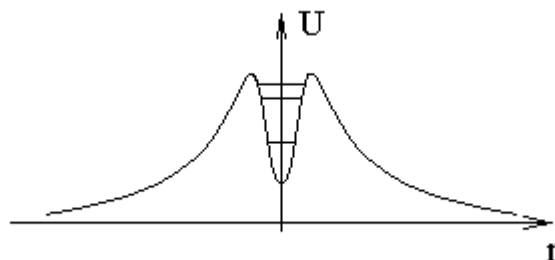
Можно подобрать такой световой импульс S , который переводит атомы из суперпозиционного нижнего состояния ψ_+ в чистое нижнее состояние ψ_g , а из состояния ψ_- в состояние ψ_h . В эксперименте, начиная с момента светового импульса S , начинаются квантовые биения.

Квантовое туннелирование. α -распад атомного ядра. Молекула аммиака.

Туннелирование — квантовый переход через потенциальный барьер, через состояние для которого недостаточно энергии.

Пример — α -распад атомного ядра.

Зависимость потенциальной энергии α -частицы от расстояния до центра атомного ядра имеет вид потенциальной ямы с центром в центре ядра. По бокам ямы — потенциальный барьер, за границами которого потенциальная энергия спадает до уровня ниже, чем в центре потенциальной ямы.



Возможные уровни полной энергии α -частицы внутри потенциальной ямы изображены на рисунке горизонтальными отрезками. Эти уровни имеют энергию ниже высоты потенциального барьера и по законам классической физики, находясь на любом из таких уровней энергии, α -частица не может вылететь за пределы потенциальной ямы. По законам квантовой механики, постоянно ударяясь о стенку потенциального барьера, α -частица рано или поздно обязательно пролетит через барьер и окажется снаружи потенциальной ямы. В этом и состоит α -распад атомного ядра. Чтобы вероятность α -распада была заметной нужно, чтобы потенциальный барьер был невысоким и узким.

Таким образом, квантовая механика позволяет квантовым объектам изредка проходить через невозможные промежуточные состояния.

Интересен вопрос, можно ли обнаружить α -частицу в тот момент, когда она преодолевает потенциальный барьер и имеет координаты, соответствующие потенциальной энергии большей, чем ее полная энергия?

Оказывается, что можно, но для этого необходимо, чтобы барьер был очень узким. Если барьер недостаточно узкий, то для случайного попадания частицы в соответствующую область пространства не хватит времени существования Вселенной.

При попытке любым способом поймать частицу на малом отрезке Δx внутри узкого барьера, частице сообщается неопределенный импульс такой,

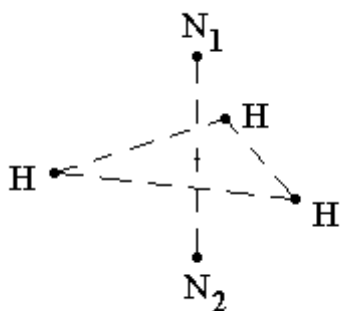
что $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ в соответствии с соотношением неопределенности

Гейзенберга. Большая неопределенность импульса означает большую величину

среднего квадрата импульса и, следовательно, большую энергию. То есть, в процессе измерения координаты α -частицы ей сообщается неопределенная энергия, которой в сумме со своей полной энергией достаточно для нахождения α -частицы в месте потенциального барьера с потенциальной энергией большей, чем полная энергия α -частицы.

Преодоление потенциального барьера между симметрично расположенными потенциальными ямами приводит к удвоению уровней энергии.

Рассмотрим молекулу аммиака NH_3 .



Атом азота имеет два возможных устойчивых положения равновесия N_1 и N_2 . Одно из них находится над плоскостью треугольника из атомов водорода, другое — под плоскостью. Электроны смещаются от водородов к азоту, и молекула имеет дипольный момент.

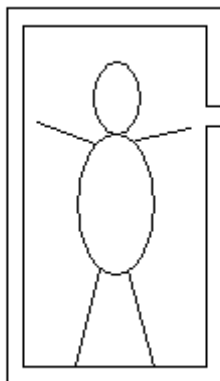
Атом азота совершает туннельные переходы между этими двумя состояниями. При этом дипольный момент молекулы осциллирует и излучает энергию. Следовательно, если аккуратно собрать молекулу так, чтобы атом азота оказался с одной стороны, то дипольный момент молекулы будет осциллировать и излучать энергию. Если молекула не излучает, то оказывается, что в каждом квантовом состоянии молекулы с определенным значением энергии атом азота одновременно находится и над и под плоскостью треугольника. То есть волновая функция состояния с определенной энергией — это суперпозиция волновых функций состояния атома азота над плоскостью и атома азота под плоскостью треугольника. Волновые функции над и под плоскостью атомов водорода можно сложить или вычесть друг из друга, в результате получается симметричная или антисимметричная волновая функция молекулы аммиака. Разность энергий ΔE между состояниями с симметричной и антисимметричной волновыми функциями очень мала. Частота ν перехода между этими двумя уровнями равна частоте туннельных переходов атома азота через плоскость треугольника

$$\Delta E = h\nu .$$

Аналогичное расщепление уровней энергии, связанное с квантовым туннелированием электронов, происходит в твердом теле. В результате туннелирования электронов от потенциальной ямы одного атома к потенциальной яме соседнего атома образуются энергетические зоны вместо

каждого уровня энергии уединенного атома. Число подуровней энергии в каждой зоне равно числу атомов в твердом теле.

С точки зрения квантовой механики туннелирование происходит через любой потенциальный барьер. Так, если человек находится в замкнутой камере, в которой есть окно размером с кулак, то человек рано или поздно совершит туннельный переход через это окно и окажется снаружи камеры.



Естественно, что ждать такого события придется гораздо дольше времени существования Вселенной.

Супертонкая структура уровней молекул SF₆ и SiF₄.

Такое же расщепление уровней энергии происходит в спектрах высокосимметричных молекул, таких как SF₆ и SiF₄. Расщепление уровней энергии происходит в результате туннелирования между состояниями вращения вокруг эквивалентных осей симметрии молекулы. Это расщепление наблюдается методами нелинейной лазерной спектроскопии и проявляется в спектре насыщенного поглощения в виде тесных спектральных кластеров.

Волна вероятности, длина волны де Бройля.

В экспериментах по отражению электронов от металла (~1927г) наблюдаются максимумы диаграммы направленности рассеянных электронов. Эти максимумы можно объяснить, если считать, что металл для пучка электронов играет роль отражательной дифракционной решетки, а сам пучок электронов можно рассматривать, как некоторую волну.

Де Бройль предположил, что любой частице соответствует волна. Длину волны можно найти из релятивистских соотношений.

Фаза любой плоской монохроматической волны $(\omega t - (\vec{k}, \vec{r}))$ — это скаляр по группе Лоренца, $\begin{pmatrix} ct \\ \vec{r} \end{pmatrix}$ — 4-х вектор или контравариантный тензор первого ранга относительно преобразования Лоренца.

Тогда $\begin{pmatrix} \omega \\ c \\ \vec{k} \end{pmatrix}$ — 4-х вектор, так как его свертка с 4-х вектором $\begin{pmatrix} ct \\ \vec{r} \end{pmatrix}$ дает скаляр $(\omega t - (\vec{k}, \vec{r}))$.

Следовательно, $\begin{pmatrix} \hbar\omega \\ c \\ \hbar\vec{k} \end{pmatrix}$ — 4-х вектор для любой волны, где $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ —

волновое число.

Сравним этот 4-х вектор с 4-х вектором энергии-импульса $\begin{pmatrix} E \\ c \\ \vec{p} \end{pmatrix}$ для

любой частицы.

Для фотона оба этих 4-х вектора равны, так как

$$\begin{cases} \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} \\ p = mV = mc = \frac{mc^2}{c} = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar \frac{\omega}{c} = \hbar k \end{cases} .$$

Де Бройль предположил, что два 4-х вектора $\begin{pmatrix} \hbar\omega \\ c \\ \hbar\vec{k} \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} E \\ c \\ \vec{p} \end{pmatrix}$ равны друг

другу не только для фотона, но и для любой другой частицы и соответствующей ей волны.

Тогда $\begin{cases} E = \hbar\omega \\ p = \hbar k \end{cases}$ для любой частицы. Из равенства $p = \hbar k = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$

получим:

$\lambda = \frac{h}{p}$ — длина волны де Бройля. Формула справедлива и в

релятивистском случае.

Электрон в атоме водорода.

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

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



Обойдя вокруг ядра атома, мы вернемся к исходной точке на орбите электрона, расположенной в исходном направлении относительно ядра атома. При возвращении в исходную точку волна оказалась в другой фазе. Мы хотели нарисовать волну в один момент времени. Волна — это функция, которая в один момент времени в каждой точке орбиты должна иметь единственное значение. Функция не может быть многозначной. Следовательно, мы нарисовали неудачную волну, которая не может существовать.

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

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

$$\begin{cases} 2\pi r = n \frac{h}{mV} \\ m \frac{V^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} r = n^2 \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \\ V = \frac{e^2}{2nh\epsilon_0} \end{cases}$$

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

$$E_n = \frac{mV^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{me^4}{8h^2\epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}.$$

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

Это правильные значения уровней энергии электрона без учета малых поправок. Не учтена поправка на магнитное взаимодействие спин-орбита (тонкая структура уровней); релятивистская поправка зависимости массы электрона от его скорости; поправка магнитного взаимодействия магнитного момента ядра с магнитным моментом электрона (сверхтонкая структура уровней); лэмбовский сдвиг уровней (разница энергий уровней $2^2S_{1/2}$ и $2^2P_{1/2}$). Здесь в выражении типа $n^{2S+1}L_J$: n — главное квантовое число, S — суммарный спин электронной оболочки, $2S+1$ — так называемая мультиплетность терма, J — полный момент импульса, L — суммарный орбитальный момент импульса электронной оболочки. Сдвиг уровней состоит из двух частей. Основная часть лэмбовского сдвига уровней вызвана взаимодействием электрона с электрическим полем флуктуаций вакуума. Это поле дёргает электрон и как бы размазывает электрон по малому объему. Если рассматривать электрон размазанным по объему некоторого малого шара, то его кулоновская энергия взаимодействия с ядром атома по модулю будет больше, чем энергия взаимодействия точечного электрона с ядром атома. Меньшая часть лэмбовского сдвига уровней связана с рождением виртуальных электрон-позитронных пар вблизи атомного ядра. Есть еще меньшая часть, которую объясняют тем, что протон имеет кварковую структуру и поэтому не совсем шарообразный.

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

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