

В. А. ДЬЯКОВ

БИБЛИОТЕКА

по

РАДИО

ЛЕКТРОНИКЕ

ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ЭЛЕКТРОНИКУ



«ЭНЕРГИЯ»

БИБЛИОТЕКА ПО РАДИОЭЛЕКТРОНИКЕ



Выпуск 16

В. А. ДЬЯКОВ

ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ЭЛЕКТРОНИКУ



«ЭНЕРГИЯ»

МОСКВА 1969



Scan AAW

6П2.15
Д93
УДК 621.378

Дьяков В. А.

Д93 **Введение в квантовую электронику.** М., «Энергия», 1969.

264 с. с илл. (Библиотека по радиоэлектронике. Вып. 16).

Описаны принципы действия электронных приборов квантового типа и изложены основные идеи, понятия и методы нерелятивистской квантовой механики.

Книга предназначена для радиоинженеров, желающих серьезно заняться квантовой электроникой.

3-3-12
336-68

6П2.15

Дьяков Владимир Александрович

Введение в квантовую электронику

Редактор *Л. В. Тарасов*

Технический редактор *Л. М. Кузнецова*

Корректор *В. С. Антипова*

Сдано в набор 20/IX 1968 г.

Подписано к печати 3/II 1969 г.

Т-02539

Формат 84×108/32

Бумага типографская № 1

Усл. печ. л. 13,83

Уч.-изд. л. 13,02

Тираж 15 000 экз.

Цена 69 коп.

Зак. 1485

Издательство «Энергия». Москва, Ж-114, Шлюзовая наб., 10.

Московская типография № 10 Главполиграфпрома
Комитета по печати при Совете Министров СССР.
Шлюзовая наб., 10.

ОТ РЕДАКТОРА

Предлагаемая вниманию читателей книга В. А. Дьякова «Введение в квантовую электронику» представляет собой полезное руководство для всех, кто начинает изучать квантовую электронику с намерением глубоко и основательно освоить эту область квантовой физики, не удовлетворяясь поверхностным знакомством с предметом. Структура книги весьма удачно соответствует динамике процесса познания. Сначала, на первом этапе, приводится достаточно элементарное изложение основ теории взаимодействия излучения с веществом и принципов работы квантовых приборов. Это изложение основывается на известных общих принципах и не требует от читателя специальных познаний по квантовой механике. Затем, на втором этапе, дается подробное и систематическое изложение основных идей и математического аппарата нерелятивистской квантовой механики в той мере, в какой это необходимо для более глубокого рассмотрения проблем квантовой электроники. Такое более глубокое рассмотрение начинается на третьем этапе. Книга как бы обрывается параграфом, посвященным квантованию электромагнитного поля, порождая у читателя мысль о том, что указанный третий этап отнюдь не является последним.

Книга В. А. Дьякова представляет собой действительно введение в квантовую электронику, причем введение достаточно добротное и основательное, сделанное со вкусом. Эта книга дает все необходимые начальные сведения по теории взаимодействия электромагнитного излучения с квантовыми системами и хорошо подготавливает серьезного читателя к дальнейшему, более глубокому и систематическому изучению квантовой электроники.

Л. В. Тарасов

ПРЕДИСЛОВИЕ

Более 10 лет тому назад возникла и начала весьма успешно развиваться новая область техники—квантовая электроника, в основе которой лежит использование явления так называемого индуцированного излучения.

Как известно, это понятие было введено Эйнштейном в 1917 г.

Идея усиления электромагнитных волн с помощью неравновесных квантовых систем была впервые сформулирована советскими физиками Фабрикантом, Вудынским и Бутаевой. За это открытие им было выдано в 1951 г. авторское свидетельство.

Примерно с начала 50-х годов академиками Н. Г. Басовым, А. М. Прохоровым и их учениками был проведен ряд фундаментальных теоретических и экспериментальных исследований, послуживших основой для создания конкретных образцов квантовых генераторов и усилителей. За эти работы Н. Г. Басов и А. М. Прохоров были удостоены Ленинской премии, а затем одновременно с американским физиком Ч. Таунсом им была присуждена Нобелевская премия.

Несмотря на то что после создания первых электронных приборов квантового типа прошло более 10 лет, этот вид техники для многих радиоспециалистов остается еще недостаточно хорошо освоенным.

Появление квантово-механических электронных приборов явилось крупным событием в истории развития радиотехники. Применение этих приборов позволило решить ряд новых крайне важных технических задач. Кроме того, практическое использование квантовых приборов обусловило качественный скачок и в чисто научном отношении. Если до последнего времени радиотехника основывалась лишь на законах классической физики, то теперь ее основой является также и квантовая

физика с ее понятиями, законами, с ее специфическим математическим аппаратом.

Для правильного и глубокого понимания процессов, происходящих в квантовых приборах, необходимо освоение совершенно новых, непривычных, а главное необычных с классической точки зрения физических представлений, составляющих основу квантовых явлений. Овладение этими новыми физическими представлениями и методами их математического описания становится для радиоинженеров насущной необходимостью.

В настоящее время уже ни у кого не возникает сомнения в том, что квантовые понятия и представления являются не только закономерными и практически полезными, но что они должны стать с течением времени столь же обычными, как и понятия и представления классической физики. Это является настоящим требованием времени, и чем ранее будет осуществлено освоение радиоинженерами этих новых представлений, тем больший эффект можно ожидать от их работы в будущем.

Существующую уже довольно обширную литературу по квантовой электронике можно разделить на две основные группы. Одна из них относится к серьезным теоретическим трудам, другая — к популярному изложению различных вопросов квантовой электроники.

Нам представляется, что назрела необходимость в создании пособий, которые заняли бы некоторое промежуточное положение между указанными выше группами. Их цель — изложить на достаточно строгом в научном отношении уровне тот минимум теоретических сведений, который послужил бы некоторым фундаментом для дальнейшего совершенствования в данной области.

Именно такая идея и была положена в основу написания настоящей книги. Автор прекрасно понимал всю ответственность и сложность поставленной перед ним задачи и не обольщался возможностью ее безупречного решения. Однако, если предлагаемый вниманию радиоспециалистов труд все-таки сыграет некоторую положительную роль и быть может послужит для некоторых стимулом к написанию более удачных пособий подобного типа, автор будет считать свою задачу в какой-то мере выполненной.

Настоящая книга построена следующим образом.

Во введении, из чисто методических соображений, дан краткий перечень основных этапов из истории радиотехники, связанных с развитием электроники.

Первая глава посвящена основам элементарной теории взаимодействия поля излучения с веществом и принципам действия типовых квантовых приборов СВЧ и оптического диапазонов.

Во второй главе излагаются основные идеи, понятия и методы нерелятивистской квантовой механики.

Наконец, третья глава включает в себя один из наиболее важных для квантовой электроники разделов, в котором рассматривается полуклассическая теория квантовых переходов и излучения атома. Эта глава заканчивается параграфом, посвященным введению в квантовую теорию излучения с тем, чтобы дать некоторое представление об этой наиболее трудной, но весьма важной как в научном, так и прикладном отношении области квантовой физики.

Трудности, которые встретил автор при выборе необходимого материала, в формулировках некоторых отдельных положений, а также в построении данного руководства в целом, были в значительной степени преодолены благодаря научному редактированию рукописи кандидатом физико-математических наук Л. В. Тарасовым, за что автор ему глубоко признателен.

Выражаю свою искреннюю признательность рецензенту книги доктору физико-математических наук М. Е. Герценштейну, советы и критические замечания которого были учтены автором при подготовке рукописи к печати.

Автор считает своим приятным долгом поблагодарить своих товарищей по работе: доктора технических наук проф. И. А. Болошина, доктора технических наук профессора О. Н. Литвиненко, доктора физико-математических наук профессора М. Е. Балабанова и кандидата физико-математических наук доцента В. А. Михайлова, с которыми были проведены весьма полезные обсуждения по отдельным вопросам излагаемого в книге материала.

Автор

ВВЕДЕНИЕ

ИСТОРИЯ ВОПРОСА

Прогресс электроники, обусловленный замечательными достижениями физики последних десятилетий, тесно связан с радиотехникой, с непрерывно возникавшими в ней проблемами. Решение этих проблем всегда являлось мощным стимулом для исследования и разработок в области электронных приборов. Поэтому представляет интерес напомнить об основных этапах развития радиотехники, которые ярко свидетельствуют об органической связи ее с электроникой.

Экспериментальное подтверждение максвелловской концепции электромагнитных явлений было осуществлено в конце прошлого столетия Г. Герцем. Проверка основных положений новой теории проводилась, выражаясь языком современной радиотехники, на волнах дециметрового диапазона. Установленная Максвеллом тождественность радиоволн со световыми явилась толчком к изысканию в дальнейшем способов получения еще более коротких волн с целью сомкнуть диапазон невидимых лучей со световыми. Известно, что в 1895 г. проф. П. Н. Лебедеву при проведении опытов по давлению света удалось получить электромагнитные колебания на волне длиной в 6 мм, а в 1922 г. проф. Глаголева-Аркадьева добилась излучения на волнах порядка 0,1 мм. Однако все эти достижения имели чисто научный характер и не представляли до поры до времени какой-либо практической ценности.

В диаметрально противоположном направлении пошли в своих исследованиях создатель радио А. С. Попов и его последователи. Они выбрали для практического использования радиоволн единственно приемлемый в то время путь, а именно постепенный переход ко все более

длинным волнам. Преимущества такого направлений особенно ощутительно проявились, когда начала проводиться работа с незатухающими колебаниями, генерируемыми такими типично «длинноволновыми» источниками электромагнитной энергии, как дуговые генераторы и машины высокой частоты.

Новый и принципиально важный этап в развитии радиотехники наступил с появлением электронной лампы. Электронная лампа явилась необычайно гибким и в то же время достаточно простым средством генерирования и усиления колебаний; она позволила осуществлять модуляцию, детектирование и ряд других видов преобразований высокочастотных колебаний. Главным положительным свойством электронной лампы явилась практически полная ее безынерционность, не ставившая, как казалось в то время, никаких пределов в получении колебаний сколь угодно высокой частоты. С появлением лампы в радиотехнике наступила эра коротких волн. Однако на первом этапе (вскоре после первой мировой войны и до начала 20-х годов) коротковолновый диапазон, как известно, не рассматривался как имеющий какое-либо практическое значение и был предоставлен на первых порах радиолюбителям. Известно, что в результате опыта их работы была подтверждена, предсказанная еще в 1902 г. Хевисайдом и Кеннели, принципиально важная роль ионосферы в распространении коротких волн. Впоследствии диапазон коротких волн становится основным для осуществления связи на предельно далекие расстояния. С появлением ламповых генераторов и тех гибких средств управления электромагнитными колебаниями и приема радиосигналов, которые предоставила ламповая техника, начала бурно развиваться радиотелефония.

Дальнейший прогресс радиотехники привел, как известно, к освоению еще более коротких волн, а именно волн метрового диапазона, с помощью которых была осуществлена высококачественная передача сложных звуковых колебаний и в конечном итоге передача телевизионных изображений.

Таким образом, если длинноволновая радиотехника явилась по существу телеграфной, а коротковолновая — телефонной, то метровый диапазон по праву может быть назван телевизионным. Примерно такое положение сложилось к началу второй мировой войны.

С расширением диапазона рабочих волн, увеличением числа одновременно работающих станций и непрерывным увеличением дальности их действия, естественно, возникали вопросы, связанные как с взаимными помехами радиостанций, так и помехами радиоприему, возникающими в тех средах, через которые проходили радиоволны. Помехи выражались различным образом: в виде сильных щелчков и тресков от грозových разрядов, проявляющихся в основном в диапазоне длинных волн; в виде замираний сигналов (феддингов) на коротких волнах; во взаимном мешании радиостанций, работающих на близких друг к другу несущих частотах. Однако возникавшие в связи с этим затруднения довольно успешно преодолевались относительно простыми средствами, а именно введением авторегулировок усиления приемника, повышением его избирательных свойств, увеличением мощности передатчика, повышением стабильности частоты генерируемых колебаний, применением узконаправленного излучения и т. п.

Вопрос о помехоустойчивости радиотехнических каналов существенно осложнился с появлением новых задач. К ним в первую очередь следует отнести возникшую в ходе второй мировой войны радиолокацию. Процесс неуклонного развития этого важного направления не прекращается и до настоящего времени. Первые радиолокационные станции обнаружения воздушных целей работали в диапазоне метровых волн. Вскоре начали применяться станции ближнего действия для более точного определения координат целей. Эти станции работали на волнах сантиметрового диапазона, т. е. того диапазона, который впоследствии стал для радиолокации основным. Следует попутно заметить, что успешное освоение локацией сантиметровых волн связано в основном с созданием и усовершенствованием электронных приборов пролетного типа (магнетронов, клистронов, ЛБВ и др.).

До тех пор пока воздушные цели обладали относительно малыми скоростями и по тактическим соображениям могли быть обнаруживаемы на сравнительно близких расстояниях с относительно небольшой точностью, задачи радиолокации решались достаточно просто и различного рода помехи не оказывали сколько-нибудь заметного влияния на прием сигналов. Поэтому при существовавших в то время мощностях передатчиков и

чувствительности приемников диапазоны дециметровых и сантиметровых волн можно было считать практически «бесшумными».

С развитием авиационной техники, повышением тактико-технических показателей летательных аппаратов и особенно с появлением баллистических ракет задачи радиолокации резко усложнились. Требуемые дальности действия станций возросли по крайней мере на порядок. При этом возросли также и требования к точности определения дальности, угловых координат и скорости полета воздушных целей. И в других областях радиотехники — в радионавигации, радиотелеуправлении, радиосвязи — тактико-технические требования к приемопередающим устройствам также значительно повысились.

В связи с освоением космоса число и важность радиотехнических задач увеличились особенно резко.

Изучение космического пространства ведется, как известно, по двум основным направлениям. С одной стороны, начали интенсивно использоваться и совершенствоваться методы радиоспектроскопии, которая наряду с более старой и хорошо уже освоенной оптической спектроскопией позволила с помощью специальных устройств существенно расширить круг астрономических и астрофизических наблюдений. В частности, на этой основе возникло новое научное направление, получившее название **радиоастрономия**.

С другой стороны, освоение космоса начало проводиться и более прямыми методами — путем запуска искусственных спутников Земли и межпланетных летательных аппаратов, снабженных соответствующей радиоаппаратурой. Таким образом, была установлена связь, непосредственно дававшая необходимую информацию из космического пространства на наземные пункты. Наконец, еще одной из форм установления «контакта» между Землей и Космосом явились опыты по радиолокации Солнца и планет Солнечной системы. Совершенно очевидно, что проникновение человека в космические просторы непосредственно связано с проблемой установления различного вида радиосвязей на расстояния, исчисляемые сотнями тысяч километров и более.

Очевидно, что добиться решения этой проблемы возможно было, в принципе, двумя способами: увеличением мощности передатчиков и повышением чувствительности

приемников. Что касается вопроса точности в определении координат целей, особенно угловых, то здесь наиболее радикальным решением явилось использование предельно коротких волн, позволяющих с наибольшей легкостью осуществить узконаправленное излучение. Однако этот путь оказался для радиотехники весьма сложным и чреватым различного рода противоречиями.

Решение этой проблемы в настоящее время приобрело несколько иную окраску в связи с появлением оптической когерентной техники и включением в шкалу электромагнитных волн, используемых в радиотехнике, и волн оптического диапазона.

Изучение проблемы существенного повышения дальности действия радиоустройств сразу же выявило принципиальные затруднения решения ее путем лишь увеличения мощности передатчика. Действительно, не говоря уже о трудностях создания весьма мощных генераторов СВЧ, тем более если это решение стеснено соображениями габарита и веса установок, даже значительное повышение мощности не дает в силу известных закономерностей заметного эффекта в дальности действия. Это обстоятельство и ряд других соображений, главным образом конструкторско-технологического характера, послужили причиной обратить более серьезное внимание на другое направление, а именно на создание высокоизбирательных приемников с предельно высокой чувствительностью.

Основной проблемой явилась борьба с шумовыми помехами. Различного рода электромагнитные колебания естественного происхождения являются в основном не чем иным, как тепловым излучением нагретых тел — Земли, атмосферы, звезд, галактик, межзвездного газа и т. п. Таким образом, все, что окружает любой радиоприемник, представляет собой как бы единый, огромный по размерам генератор шумовых колебаний, охватывающих весь известный нам диапазон электромагнитных колебаний — от сверхдлинных радиоволн до самого жесткого рентгеновского излучения. Этот «размытый» в мировом пространстве «генератор помех» имеет центры особо интенсивных излучений в виде Солнца, Луны, ярких созвездий и т. п. Однако основным источником шума оказался сам приемник.

На длинных, средних и даже коротких волнах собственный шум обычных приемников не играл практически

никакой роли, так как их чувствительность была незначительной, а мощность полезного сигнала на входе приемника — достаточно большой. В диапазоне же СВЧ при весьма слабых сигналах и высокой чувствительности приемника внешние шумы оказываются соизмеримыми с собственными шумами приемника и ими уже не только нельзя пренебрегать, но в ряде случаев необходимо считать их основным фактором, определяющим величину реальной чувствительности приемника. Отсюда следует что основной задачей становится разработка усилителей высокой частоты, при которых чувствительность приемника определялась бы лишь внешними, по сути дела неуправляемыми, помехами.

В разрешении проблемы борьбы с шумовыми помехами наметились два, не исключающие, а, наоборот, дополняющие друг друга пути. Первый из них состоял в создании, как об этом уже было сказано выше, малошумящих элементов приемника, в первую очередь электронных приборов, работающих в качестве входных усилителей высокой частоты. Вторым путем явилась разработка так называемых статистических методов приема сигналов, в результате применения которых разрешалась задача оптимальной фильтрации, т. е. выделения полезного сигнала на фоне подавленного шума.

Дальнейшее развитие радиотехники показало, что применение малошумящих элементов приемника в сочетании, в необходимых случаях, с оптимальными методами обработки сигналов явилось наиболее радикальным способом решения проблемы радиосвязи на предельно далекие расстояния.

Для сравнительной оценки в дальнейшем шумовых свойств квантовых электронных приборов напомним некоторые данные, характеризующие шумовые свойства различных объектов, обуславливающих общий шумовой фон, на котором осуществляется прием радиосигналов.

Средняя шумовая температура поверхности Земли составляет $250\text{—}300^\circ\text{K}$. Это обстоятельство требует соблюдения некоторых условий при выборе формы диаграммы направленности антенны и ее ориентации по отношению Земли. Очевидно, надо стремиться к тому, чтобы главный лепесток диаграммы не был без особой необходимости направлен в сторону Земли и, кроме того, чтобы уровень боковых лепестков был по возможности малым.

Шум атмосферы зависит от диапазона волн, ориентации антенны и метеорологических условий. Ее шумовая температура увеличивается с укорочением длины волны. При горизонтальной ориентации антенны относительно Земли эта температура на порядок выше, чем при вертикальной ориентации, и составляет примерно 30°K на волне 3 см и 300°K на волне 8 мм.

Шумы галактики также зависят от диапазона волн и ориентации антенны. Однако эти шумы, наоборот, с укорочением длины волны уменьшаются и, например, для сантиметровых волн не превышают нескольких градусов Кельвина.

Что касается **локальных источников космического шума**, то прежде всего от них можно избавиться соответствующей ориентировкой антенны и использованием, если это возможно, узкой диаграммы направленности. Шумовая температура этих источников достаточно высокая. Так, например, шумовая температура Луны составляет $150\text{—}250^\circ \text{K}$, а Солнца в зависимости от его состояния — от 10^5 до 10^9K .

К местным источникам шума надо отнести также антенно-фидерное устройство, в котором возникают шумы вследствие тепловых потерь в его элементах. Шумовая температура антенно-фидерного тракта находится примерно в пределах от 3 до 20°K .

Практически доказано, что путем надлежащих мер общую (суммарную) шумовую температуру от внешних источников (включая и антенно-фидерный тракт) можно довести до $15\text{—}18^\circ \text{K}$. Что же касается шумовой температуры обычных электронных ламп, то она крайне высока, примерно на два порядка больше указанной выше, и составляет около 1500°K . Для пролетных ламп (типа лампы бегущей волны) эта цифра может быть резко снижена и доведена до $200\text{—}300^\circ \text{K}$.

Таким образом, основным источником шума является сама электронная лампа и, главным образом, та, которая работает во входном каскаде высокой частоты. Поэтому явилось естественным и своевременным возникновение проблемы создания усилительных электронных приборов с предельно низкой шумовой температурой. Принципиальная возможность решения этой задачи всецело определялась состоянием науки об электромагнитных свойствах различных веществ. Одним из фундаментов, на которых были построены необходимые исследо-

вания, явилась спектроскопия, ее методы, ее богатый экспериментальный материал.

С развитием радиотехнических методов спектроскопия существенно расширила свои границы, охватив не только оптический и инфракрасный диапазоны волн, но и диапазон СВЧ. Так, в 1934 г. опытным путем было установлено интенсивное поглощение парами аммиака радиоволн длиной около 1,25 см. Спектроскопические наблюдения в диапазоне радиоволн приобрели особенно сильный размах после технического освоения сантиметровых волн, используемых в радиолокации. Здесь уместно подчеркнуть одно интересное обстоятельство. Если оптическая спектроскопия использовала, в первую очередь, естественные источники излучения, воспринимаемые непосредственно органами зрения, то радиоспектроскопия могла появиться и успешно развиваться лишь после того, как были достаточно хорошо изучены условия прохождения радиоволн через различные среды. А это в свою очередь стало возможным лишь с появлением радиотехники, с решением ею различных практических задач. Так, например, в 1942 г. исследованиями В. Л. Гинзбурга в СССР и Ван-Флека в США было установлено сильное поглощение, главным образом водяными парами земной поверхности, радиоволн длиной от 1,2 до 1,6 см. Известно, что этот факт воспрепятствовал использованию этих волн для целей локации и уже построенная станция на $\lambda=1,25$ см не была передана в эксплуатацию, а использовалась впоследствии в научных экспериментальных исследованиях.

Однако до определенного времени все это были случайные, разрозненные, хотя и весьма полезные, наблюдения, которые лишь в 1946 г. сложились в новое научное направление, которое было названо **радиоспектроскопией**. Особо важное прикладное значение исследований в этой области имело обнаружение так называемой тонкой и сверхтонкой структуры спектральных линий, образование которых связано главным образом с магнитными свойствами молекул, атомов и ядер некоторых веществ.

Создание усилителей высокой частоты с низкой шумовой температурой оказалось возможным лишь после того, как были достаточно глубоко изучены физические свойства веществ с точки зрения их молекулярно-атомного строения. Спектроскопия и в первую очередь радиоспектроскопия, базирующиеся на современной теории

атома и пользующиеся аппаратом квантовой механики, позволили создать новый тип электронных приборов, известных сейчас под названием квантово-механических или, просто, квантовых приборов.

Одним из первых усилителей СВЧ квантово-механического типа был усилитель, принцип действия которого основан на явлении электронного парамагнитного резонанса и потому получивший название **парамагнитного усилителя**. Одним из самых замечательных свойств такого усилителя является его крайне низкая шумовая температура, составляющая всего лишь $10\text{--}15^\circ\text{K}$, т. е. на два порядка ниже шумовой температуры обычного супергетеродина. Очевидно, что во столько же раз может быть повышена чувствительность приемника.

Необходимо отметить, что если в течение почти 40 лет чувствительность приемников удалось повысить лишь в 2—4 раза, то с появлением квантовых приборов эта цифра возросла до 100.

С проблемой высокочувствительного и избирательного приема непосредственно связан вопрос о генерировании передатчиками колебаний с предельно высокой стабильностью частоты. Решение этой проблемы было важно также для радиолокационных и радионавигационных систем, работа которых связана с требованием исключительно большой точности в определении координат и скорости движущихся целей.

Непостоянство несущей частоты оценивается, как известно, относительной величиной $\Delta f/f_0$, где f_0 — несущая частота, а Δf — максимальный уход частоты от номинального значения f_0 . В обычных радиопередатчиках используются различные способы стабилизации как чисто схемные, так и с применением специальных устройств, например генератора, стабилизированного кварцем. При этом достигается нестабильность частоты порядка $10^{-5}\text{--}10^{-6}$, и лишь в отдельных случаях она получается более низкой. И в этой проблеме решающее слово было сказано квантовыми приборами. Одним из первых генераторов СВЧ такого типа, осуществленным в 1954 г., явился **молекулярный газовый генератор**, использующий в качестве активного вещества пучок молекул аммиака. Длина волны такого генератора $\lambda = 1,25\text{ см}$. Нестабильность частоты у этого генератора достигает величины порядка $10^{-11}\text{--}10^{-12}$, т. е. на 3—6 порядков меньше, чем у передатчиков с кварцевой ста-

билизацией. Квантовые усилители и генераторы, работающие в диапазоне СВЧ, получили за рубежом сокращенное название **мазеры** (Microwave amplification by stimulated emission of radiation), которое иногда используется также и в нашей литературе.

Дать краткое и простое объяснение факта чрезвычайно высокой стабильности молекулярного генератора без привлечения аппарата строгой квантовой теории не представляется возможным. Одной из причин такого свойства является относительно большая изолированность молекул вещества от окружающего пространства, а также сам механизм так называемого индуцированного излучения, на принципе которого основывается работа квантовых приборов.

Говоря о практическом использовании электромагнитных излучений, целесообразно разделить их на две основные группы, а именно на некогерентные и когерентные, а по условиям их возникновения — на спонтанные и индуцированные (стимулированные).

Первое, с чем столкнулся человек с момента своего появления на Земле, было, естественно, световое излучение, как непосредственно воздействующее на органы зрения. Как известно, это излучение в своей основе является некогерентным, спонтанно возникающим и связанным с тепловым состоянием окружающих нас предметов. Впоследствии было установлено, что тепловое излучение распределено в соответствии с законом Планка по всему спектру частот — от 0 до ∞ , причем на область очень высоких частот (ультрафиолетовых и рентгеновских лучей) и очень низких частот (радиочастот) приходится ничтожно малая доля полного излучения.

Из-за отсутствия естественных индикаторов радиоизлучений они долгое время оставались за пределами человеческого знания. Этим объясняется тот факт, что так называемые радиолучи были обнаружены Г. Герцем лишь в конце прошлого столетия. Последовавшее вслед за теоретико-экспериментальными исследованиями практическое использование радиолучей и дальнейшее бурное развитие этой новой отрасли техники привели к освоению весьма широкого диапазона радиоволн — от волн, длина которых измеряется десятками тысяч метров, до волн миллиметрового диапазона.

Однако попытки продвинуться в этом направлении дальше в область инфракрасного излучения с помощью лишь методов, разработанных в области радиотехники, встретили затруднения, заключающиеся в возникновении ряда принципиально непримиримых противоречий, в преодолении которых решающую роль сыграла квантовая электроника.

Опыт работы с мазерами и новые исследования в области спектроскопии показали, что не вызывает также никаких затруднений создать на принципе индуцированного излучения усилители и генераторы также и в оптическом диапазоне волн. Первый образец такого генератора был получен в 1960 г. Он сокращенно назван **лазером** (Light wave amplification by Stimulated emission of radiation).

При создании оптических квантовых генераторов радиотехника впервые столкнулась с источником когерентных электромагнитных волн высоких частот, резко отличающихся по ряду своих свойств как от естественных источников света, так и от генераторов обычного радиодиапазона.

Таким образом, радиотехнические методы усиления и генерации колебаний проникли в диапазон световых волн. Использование этих волн открыло целый ряд новых возможностей, основными из которых являются:

существенное повышение числа каналов связи. Емкость оптического диапазона (волны от $\lambda=0,7$ мк до 0,4 мк) примерно в 10^4 раз превышает емкость всего радиодиапазона (от самых длинных волн до волн сантиметрового диапазона включительно);

резкое увеличение направленности излучения (определяемой в пределе известным соотношением для минимального расхождения луча $\theta \approx \lambda/D$, где D — диаметр апертуры излучателя) и, следовательно, повышение помехоустойчивости и скрытности передачи, а также создание необходимых предпосылок для использования ОКГ в качестве чисто энергетического источника;

повышение разрешающей способности локатора по угловым координатам;

создание следящих и навигационных систем с высокой угловой разрешающей способностью и точностью;

возможность точного измерения скорости движения объектов в широком интервале значений скоростей.

Однако использование инфракрасных и оптических волн встречает и ряд существенных затруднений, наиболее важными из которых являются следующие:

трудность создания генераторов большой мощности с достаточно высоким к. п. д.;

сложность выделения чисто монохроматического одномодового колебания (т. е. колебания одного типа);

достаточно высокий уровень шума, обусловленный спонтанным излучением фотонов большой энергии;

значительные потери электромагнитной энергии в атмосфере и других средах вследствие поглощения и рассеяния.

Таким образом, реализация устройств, работающих в оптическом диапазоне, и их практическое использование сопряжены с определенными трудностями, которые позволяют на отдельных этапах развития этого нового вида техники определять роль и место оптического диапазона среди всех прочих волн, уже используемых в радиотехнике. Большая часть трудностей является временной и в принципе устранимой. Имеются достаточные основания полагать, что квантовой электронике оптического диапазона обеспечено непрерывное совершенствование и успешное применение ее средств в самых разнообразных областях человеческой деятельности.

Представляет несомненный интерес с самого начала подчеркнуть отличительные свойства обычных и квантовых приборов.

В любом электронном приборе первичным источником высокочастотной энергии являются электроны. В приборах обычного типа используются так называемые «свободные» электроны, эмиттированные с накаливаемого катода в вакуумное пространство и движущиеся в нем под воздействием сил лишь внешних электрических и магнитных полей. Каждый такой электрон представляет собой элементарный конвекционный ток. Совокупность одновременно участвующих в этом процессе электронов образует полный конвекционный ток, являющийся одной из характеристических величин любой электронной лампы.

Основным механизмом действия таких приборов является обмен энергиями между электронами и взаимодействующим с ними полем. При этом энергия взаимодействия может принимать практически любые значения.

Такая совокупность возможных (в определенных пределах) значений энергий, образующих континуум, является одной из характерных особенностей приборов «классического» типа.

Что касается электронных приборов «квантового» типа, то в этом случае имеют дело с так называемыми «связанными» электронами, входящими в состав атомов того или иного вещества. В этом случае внешние поля находятся во взаимодействии с нейтральными в целом частицами. Результатом такого взаимодействия является изменение внутренней энергии частиц, которая может быть либо уменьшена за счет излучения энергии, либо, наоборот, пополнена вследствие поглощения частицей части энергии из окружающего ее поля. Характерной особенностью приборов квантового типа является то, что внутриатомная (а также внутримолекулярная) энергия не может иметь произвольные значения, а является величиной квантованной, связанной с частотой излучения известным правилом частот Бора

$$\omega_{nm} = \frac{|E_n - E_m|}{h},$$

где E_n и E_m — значения энергии соответственно на n -м и m -м уровнях.

Принципиальная возможность получения при соответствующих условиях когерентных электромагнитных излучений твердыми, жидкими или газообразными веществами была высказана впервые Эйнштейном еще в 1917 г. Однако реализация электронных приборов, построенных на принципе индуцированного излучения, оказалась возможной лишь в результате длительных экспериментальных исследований и решения ряда чисто технических задач.

Точное и детальное описание действия приборов подобного типа возможно лишь на основе строгой квантовой теории. Однако для ознакомления с общими принципами этих устройств вполне пригодны, в качестве первого приближения, те представления и соотношения, которые были получены еще Бором на первом этапе развития квантовой физики. Следует подчеркнуть, что основные утверждения этой полуклассической теории остаются во многом справедливыми и с позиций строгой квантовой механики. Как известно, основным недостат-

ком теории Бора оказалось то, что достаточно точное предсказание некоторых чисто внешних эффектов, связанных с внутриатомными процессами, было построено частично на не пригодных для микромира классических представлениях, и поэтому данная теория не могла служить надежным фундаментом для построения той квантовой теории, которая адекватно отображала бы во всем своем многообразии и деталях истинную природу явлений, происходящих на молекулярно-атомном уровне.

ГЛАВА ПЕРВАЯ

ЭЛЕМЕНТАРНАЯ ТЕОРИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛЯ ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ. ПРИНЦИПЫ ДЕЙСТВИЯ КВАНТОВЫХ ПРИБОРОВ

1-1. СПЕКТР ИЗЛУЧЕНИЯ АБСОЛЮТНО ЧЕРНОГО ТЕЛА

Общие замечания. Явление излучения нагретыми телами электромагнитной энергии явилось одной из главных проблем физики конца прошлого столетия. Многочисленные спектроскопические наблюдения давали обильный материал для анализа этого явления и изучения его природы. Так как спектральная картина в зависимости от испытуемых тел была самой различной, то, естественно, что ее необходимо было связать с процессами, происходящими внутри вещества. Основной задачей было определение спектральной объемной плотности поля излучения $u(\omega)$, т. е. энергии излучения, приходящейся на единицу объема в единичном частотном интервале.

Объемная плотность энергии излучения в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$, равная $u(\omega)d\omega$, определяется следующим образом.

Если объемную плотность энергии на всех частотах от 0 до ∞ обозначим через u , причем

$$u = \frac{1}{2} (\epsilon \mathcal{E}^2 + \mu H^2),$$

то спектральная объемная плотность энергии в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$ будет равна:

$$du = u(\omega) d\omega.$$

Таким образом, величины u и $u(\omega)$ связаны между собой соотношением

$$u = \int_0^{\infty} u(\omega) d\omega.$$

В проблеме теплового излучения особое место занимает абсолютно черное тело. Так называются тела,

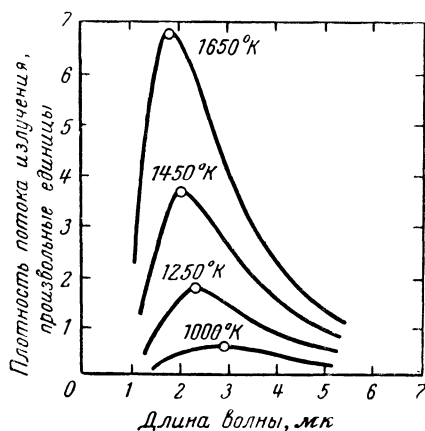


Рис. 1-1. Спектральное распределение излучения абсолютно черного тела.

полностью поглощающие падающую на них электромагнитную энергию. Доказано, что излучение такого тела определяется лишь его температурой и совершенно не зависит от материала вещества. Наблюдения показывают, что форма кривой излучения при различных температурах приблизительно сохраняется, причем максимум ее перемещается с увеличением температуры в сторону коротких волн (рис. 1-1).

Достаточно простой моделью абсолютно черного тела может служить полностью замкнутая полость. При постоянной температуре стенок внутри полости устанавливается равновесное излучение, при котором излучаемая стенками в единицу времени энергия будет в среднем равна поглощаемой ими энергии за тот же промежуток времени. Для изучения спектрального распределения равновесного излучения в полости прорежут узкую щель, через которую будет излучаться

в окружающее пространство ничтожная доля общей энергии. Поэтому поле внутри полости можно считать практически ненарушенным (рис. 1-2). Это объясняется тем, что падающие на щель внешние лучи, прежде чем снова выйти из щели, испытывают многократные отражения от внутренних стенок полости, сопровождающиеся каждый раз поглощением части энергии. Таким образом, к моменту выхода лучей из полости энергия их становится пренебрежимо малой.

В решении проблемы излучения абсолютно черного тела можно выделить три этапа:

1) термодинамическое рассмотрение проблемы;

2) рассмотрение проблемы с позиций классической электродинамики и классической статистики;

3) рассмотрение проблемы с введением условия квантования энергии.

Термодинамическое рассмотрение. На основе термодинамических соображений были получены следующие результаты.

Исследования, проведенные Кирхгофом, привели к соотношению:

$$u(\omega) d\omega = F(\omega, T) d\omega,$$

где $F(\omega, T)$ — некоторая универсальная функция частоты и температуры.

Следующим шагом в решении этой задачи явилось отыскание указанной выше функции в явном виде.

Частично эту задачу решил Вин, представив указанную выше формулу в виде

$$u(\omega) d\omega = \omega^3 F(\omega/T) d\omega.$$

Из этой формулы вытекает как следствие известный закон Стефана — Больцмана:

$$u = \sigma T^4,$$

где $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Дж/м}^2 \cdot \text{сек} \cdot \text{град}^4$.

Выразив зависимость плотности энергии от длины волны, мы придем к формуле Вина:

$$\lambda_{\text{макс}} T = \text{const},$$

известной под названием закона смещения.

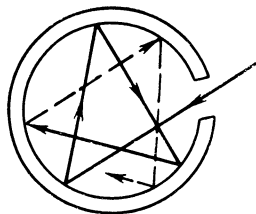


Рис. 1-2. Модель абсолютно черного тела.

Статистическое рассмотрение. Более решительная попытка раскрыть природу излучения абсолютно черного тела была сделана Джинсом по методу, предложенному Рэлеем. Этот метод основывался на законах классической электродинамики и классической статистики. Идея решения задачи состояла в следующем.

Рассматриваемую полость можно уподобить идеальному резонатору, т. е. резонатору с идеально проводящими стенками, внутри которого заключено электромаг-

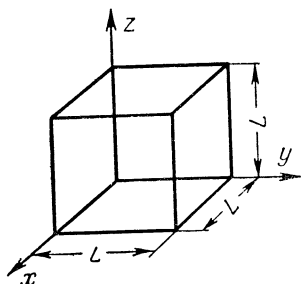


Рис. 1-3 Идеальный резонатор в виде куба.

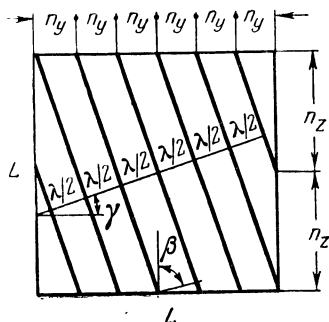


Рис. 1-4. Система стоячих волн с произвольно направленными нормальными к фронту волны.

нитное поле с постоянным, в силу равновесного излучения, запасом энергии. Поле внутри полости может быть представлено суперпозицией бесконечного числа пар стоячих волн, устанавливающихся между стенками полости. Пары волн одной и той же длины получаются вследствие учета двух возможных, ортогональных друг другу поляризаций. Каждой волне может быть сопоставлен гармонический осциллятор соответствующей частоты. В данном случае под осциллятором следует понимать диполь, момент которого гармонически меняется со временем. Таким образом, все поле излучения представляется совокупностью бесконечного числа гармонических осцилляторов, если рассматривать спектр поля излучения в неограниченном диапазоне частот. Очевидно, что в любом конечном интервале частот будет находиться конечное число осцилляторов. Найдя среднее значение энергии как функцию частоты и помножив эту функцию на число осцилляторов, приходящихся на

единицу объема полости, получив величину плотности энергии.

Для простоты расчетов считают, что полость имеет вид куба с ребром, равным L .

Очевидно, что вдоль каждого ребра будет укладываться целое число полуволен, т. е.

$$L = n \frac{\lambda}{2},$$

где $n = 1, 2 \dots$

Введя декартову систему координат (рис. 1-3) и обозначив целые числа, являющиеся числами полуволен, укладываемых вдоль соответствующих направлений, через n_x, n_y, n_z , напомним:

$$n_x = \frac{2L}{\lambda}; \quad n_y = \frac{2L}{\lambda}; \quad n_z = \frac{2L}{\lambda}.$$

В общем случае при падении волн на стенки полости под произвольными углами α, β, γ (на рис. 1-4 изображено сечение куба в плоскости yz) указанные выше соотношения примут вид:

$$n_x = \frac{2L \cos \alpha}{\lambda}; \quad n_y = \frac{2L \cos \beta}{\lambda}; \quad n_z = \frac{2L \cos \gamma}{\lambda},$$

где $\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma$ — направляющие косинусы, причем $\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$.

Из приведенных соотношений следует, что

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \left(\frac{2L}{\lambda} \right)^2$$

или, если выразить правую часть через частоту,

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \left(\frac{L\omega}{\pi c} \right)^2.$$

Это выражение представляет собой уравнение сферы с радиусом, равным

$$R = \frac{L\omega}{\pi c}.$$

Таким образом, каждой тройке чисел n_x, n_y, n_z соответствует частота, равная

$$\omega = \frac{\pi c}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}.$$

Из этой формулы следует, что трем различным комбинациям целых чисел n_x , n_y , n_z может соответствовать одна и та же частота. Это — типичный случай так называемого вырождения, при котором равным частотам отвечают различные направления распространения волн, т. е. различные типы (или моды) колебаний.

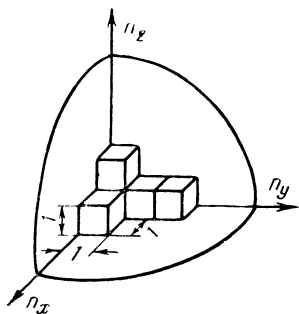


Рис. 1-5. К подсчету числа осцилляторов в пространстве чисел n .

Иными словами, каждая тройка чисел n_x , n_y , n_z определяет длину волны и направление распространения одного типа колебаний (моды). Таким образом, под типом или модой колебаний следует понимать одно из собственных колебаний замкнутой полости, характеризующееся набором трех определенных целых чисел.

Построим теперь систему точек, каждой из которых соответствует тройка положительных целых чисел n_x , n_y , n_z . Эта система образует кубическую решетку (рис. 1-5). Ребро элементарного кубика равно единице, объем каждого такого кубика также равен единице. При больших значениях частот число кубиков будет очень велико и их сумма с достаточной степенью точности равна $1/8$ объема шара, радиус которого равен $L\omega/\pi c$. Так как объем каждого элементарного кубика равен единице, то, очевидно, объем октанта будет равен числу этих кубиков, укладываемых в одном октанте. Таким образом, полное число собственных частот полости или, что то же, полное число осцилляторов поля, заключенных в интервале частот от 0 до некоторого значения ω , численно равно объему октанта, т. е.

$$N_1 = \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{L\omega}{\pi c} \right)^3 = \frac{L^3 \omega^3}{6\pi^2 c^3}. \quad (1-1)$$

При больших числах n (что отвечает указанному выше условию $\lambda \ll L$) прибавление к каждому из них по единице изменяет частоту ω на весьма малую величину. Это позволяет считать числа n_x , n_y , n_z изменяющимися непрерывно, что соответствует непрерывному изменению ω . Поэтому для определения числа собственных

колебаний, лежащих между ω и $\omega + d\omega$, необходимо продифференцировать выражение (1-1) по частоте.

Проделив это, получим:

$$dN_1 = \frac{L^3 \omega^2}{2\pi^2 c^3} d\omega.$$

Учитывая, что каждой определенной частоте отвечают два вида колебаний, отличающихся лишь поляризацией, полученное число надо удвоить, т. е.

$$dN = 2dN_1 = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} V d\omega,$$

где $V = L^3$ — объем куба.

Эта величина и является полным числом свободных колебаний в объеме V , заключенном в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$.

Величина средней энергии каждого осциллятора может быть определена через средние значения импульса и координаты по следующей известной формуле:

$$\bar{E} = \frac{\overline{p_x^2}}{2m} + \frac{m\omega^2 \bar{x^2}}{2}.$$

Плотность вероятности того, что значения энергии осциллятора находятся в пределах от E до $E + dE$, равна:

$$\omega(p_x, x) = A e^{-E/kT} = A e^{-\left(\frac{p_x^2}{2mkT} + \frac{m\omega^2 x^2}{2kT}\right)}$$

Используя это выражение, находим:

$$\begin{aligned} \overline{p_x^2} &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} p_x^2 \omega(p_x, x) dp_x}{\int_{-\infty}^{\infty} \omega(p_x, x) dp_x} = \\ &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} p_x^2 e^{-\frac{p_x^2}{2mkT}} dp_x}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{p_x^2}{2mkT}} dp_x}, \end{aligned}$$

откуда

$$\overline{p_x^2} = mkT.$$

Аналогичным образом находим выражение для $\overline{x^2}$:

$$\overline{x^2} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \omega(p_x, x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \omega(p_x, x) dx} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega^2 x^2}{2kT}} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega^2 x^2}{2kT}} dx},$$

откуда

$$\overline{x^2} = \frac{kT}{m\omega^2}.$$

Таким образом,

$$\overline{E} = \frac{mkT}{2m} + \frac{m\omega^2 kT}{2m\omega^2}$$

или

$$\overline{E} = kT.$$

Этот результат определяет содержание известной теоремы классической статистики о равном распределении средней энергии по степеням свободы системы. Таким образом, полная энергия в объеме V в пределах частоты от ω до $\omega + d\omega$ будет равна:

$$U(\omega) d\omega = \frac{\omega^2 V}{\pi^2 c^3} kT d\omega,$$

где $U(\omega) = u(\omega) V$,

а спектральная объемная плотность энергии в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$

$$u(\omega) d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT d\omega.$$

Последнее выражение и является известной *формулой Рэлея — Джинса*.

Несостоятельность классического подхода к решению проблемы излучения абсолютно черного тела становится явной, как только мы распространим полученный выше результат на весь спектр частот от 0 до ∞ . В этом

случае приходим к расходящемуся интегралу, т. е. бесконечно большой энергии:

$$u = \int_0^{\infty} u(\omega) d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \omega^2 d\omega \rightarrow \infty.$$

Это означает, что равновесное состояние возможно лишь при температуре абсолютного нуля, что противоречит опыту, подтверждающему факт установления равновесия при любой температуре.

Создавшееся положение было названо «ультрафиолетовой катастрофой». Сравнивая экспериментальную кривую $u(\omega) = F(\omega)$ с кривой, вычисленной по формуле Рэлея—Джинса (рис. 1-6), видим, что совпадение их имеет место лишь в области низких частот.

Гипотеза квантования.

Третьим этапом в решении рассматриваемой проблемы явилась гипотеза, предложенная в 1900 г. М. Планком. Она была построена на том, что энергия осциллятора не может принимать значения, меньшего некоторой минимальной величины ε и что любое другое значение энергии осцилляторов может быть лишь кратно этой величине, т. е.

$$E_n = n\varepsilon, \text{ где } n = 1, 2, \dots$$

По целому ряду соображений, о которых будет сказано далее, было принято, что

$$\varepsilon = h\omega,$$

где $h = 1,05 \cdot 10^{-34}$ дж·сек — постоянная Планка.

Таким образом, энергия каждого осциллятора может быть выражена в виде произведения $n h \omega$, где n — любое целое (положительное) число. Ввиду малости величины h любое, реализуемое на практике поле излучения включает в себя огромное число элементарных порций (квантов) энергии $h\omega$, и мы, естественно, «воспринимаем» его как непрерывный во времени и пространстве процесс.

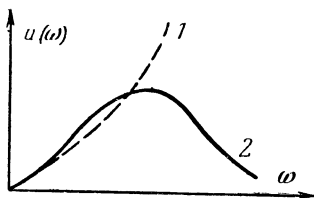


Рис. 1-6. Сравнение экспериментальной кривой 2 распределения энергии в спектре с кривой, рассчитанной по формуле Рэлея—Джинса 1.

При больших числах n для определения вероятности того, что осциллятор обладает значением энергии E_n , можно также воспользоваться распределением Больцмана, которое принимает в данном случае следующий вид:

$$W(n) = Ae^{-E_n/kT} = Ae^{-nh\omega/kT},$$

где

$$\frac{1}{A} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\omega/kT}.$$

Используя формулу для суммы бесконечной убывающей геометрической прогрессии

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x},$$

получаем:

$$W(n) = e^{-nh\omega/kT} (1 - e^{-h\omega/kT}).$$

Отсюда средняя энергия осциллятора равна:

$$\bar{E} = \sum_{n=0}^{\infty} E_n W(n) = (1 - e^{-h\omega/kT}) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\omega/kT} nh\omega$$

или

$$\bar{E} = h\omega (1 - e^{-h\omega/kT}) \sum_{n=0}^{\infty} ne^{-nh\omega/kT}.$$

Но, обозначая $h\omega/kT = x$, получаем:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} ne^{-nx} &= \frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} = -\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{1 - e^{-x}} \right) = \\ &= \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2}. \end{aligned}$$

Следовательно, величина средней энергии будет равна:

$$\bar{E} = (1 - e^{-h\omega/kT}) \frac{h\omega e^{-h\omega/kT}}{(1 - e^{-h\omega/kT})^2}$$

или окончательно

$$\bar{E} = \frac{h\omega}{e^{h\omega/kT} - 1}.$$

Используя полученную ранее величину dN и умножая ее на \bar{E} , приходим к следующей формуле для спектральной объемной плотности энергии:

$$u(\omega) d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{h\omega}{e^{h\omega/kT} - 1} d\omega.$$

Это и есть знаменитая **формула Планка**, правильно описывающая спектральное распределение энергии абсолютно черного тела во всем диапазоне частот от 0 до ∞ (см. рис. 1-6, кривая 2).

Из формулы Планка как следствие вытекают и формула Рэлея—Джинса, и формула Вина, являющиеся предельными выражениями соответственно при малых и больших частотах. Действительно, если $h\omega \ll kT$, то $e^{h\omega/kT} \approx 1 + \frac{h\omega}{kT}$ и полученное выше выражение переходит в формулу Рэлея—Джинса. Наоборот, при $h\omega \gg kT$ можно положить $e^{h\omega/kT} - 1 \approx e^{h\omega/kT}$ и получим известную формулу Вина:

$$u(\omega) d\omega = \frac{\omega^3 h}{\pi^2 c^3} e^{-h\omega/kT} d\omega.$$

Исходя из величины соотношения $h\omega/kT$, следует различать три области указанной закономерности:

- 1) $h\omega \ll kT$ — «классическая» область;
- 2) $h\omega \gg kT$ — «квантовая» область;
- 3) $h\omega \approx kT$ — «смешанная» область.

Заметим, что учет квантовых эффектов практически становится необходимым на таких частотах и при таких температурах, когда энергия фотона становится значительно больше спектральной плотности теплового шума, т. е. когда $h\omega \gg kT$. Только при этом условии оказывается возможной регистрация единичных фотонов на фоне фотонов теплового шума.

Этот вывод имеет большое значение для приема предельно слабых радиосигналов, т. е. приема их в так называемой «квантовой» области.

1-2. КОЭФФИЦИЕНТЫ ЭЙНШТЕЙНА

Поглощение и излучение при квантовых переходах. Излучение и поглощение веществом электромагнитной энергии связаны с внутренними энергетическими переходами атомов вещества из одного стационарного состояния в другое. Поскольку такие переходы случайны, основной задачей является вычисление их вероятности.

Такая задача впервые была рассмотрена Эйнштейном с точки зрения термодинамики.

Моделью исследования этой проблемы явилась совокупность атомов вещества, находящихся в тепловом равновесии со стенками окружающего их объема при некоторой постоянной температуре T . Таким образом, рассматривалась та же система, которой пользовался Планк при выводе формулы распределения спектральной плотности энергии излучения абсолютно черного тела. Основным постулатом принятым Эйнштейном, было подчинение энергетических переходов, сопровождающихся излучением или поглощением энергии, формуле Планка.

В теории Эйнштейна вводится вероятность перехода квантовой системы из одного стационарного состояния в другое. При этом под вероятностью следует понимать либо ее мгновенное значение (вероятность данного состояния к моменту времени t), либо вероятность данного перехода в единицу времени.

Предположим для простоты, что рассматриваемая нами квантовая система обладает лишь двумя энергетическими уровнями: верхним (E_2) и нижним (E_1). Система может совершать переходы с одного уровня на другой.

Установлено, что квантовые переходы системы связаны с тремя процессами: поглощением энергии системой спонтанным излучением и, наконец, с вынужденным излучением. Поглощение и вынужденное излучение могут происходить лишь при наличии внешнего электромагнитного поля. Что же касается спонтанного излучения, то оно обуславливается только внутренними свойствами вещества и потому носит характер процесса, напоминающего радиоактивный распад вещества.

Забегая несколько вперед, следует отметить, что этот вид излучения является для квантовых приборов не чем иным как шумом, так как оно беспорядочно, широкополосно и, естественно, не несет никакой полезной

информации. Примером такого излучения может служить свечение нагретых тел, люминесценция и ряд других аналогичных явлений. Следует отметить, что вероятность спонтанного излучения одновременно для всех возможных типов колебаний, как это будет показано ниже, пропорциональна ω^3 и поэтому имеет тем больший вес, чем выше частота. Этим, в частности, объясняется возможность создания на радиочастотах (т. е. на относительно низких частотах) усилителей с крайне малой шумовой температурой.

Эйнштейн ввел три коэффициента, характеризующие вероятность осуществления в единицу времени каждого из указанных выше процессов, а именно: вероятность спонтанного перехода A_{21} , вероятность поглощения $B_{12}u(\omega_{21})$ и вероятность вынужденного излучения $B_{21}u(\omega_{21})$. Здесь

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{h} \text{ — частота перехода для рассматриваемых}$$

двухуровневых систем. Заметим, что здесь и в дальнейшем первая цифра индекса относится к номеру начального состояния (уровня), вторая — к конечному состоянию. Две последние величины, являющиеся вероятностями в единицу времени соответственно поглощения и вынужденного излучения, как уже указывалось выше, связаны с наличием внешнего поля, на что указывает множитель $u(\omega_{21})$, представляющий собой плотность энергии излучения на частоте ω_{21} в единичном интервале частот. Таким образом, полная вероятность переходов со спонтанным и индуцированным излучением равна $A_{21} + B_{21}u(\omega_{21})$, а вероятность переходов с поглощением энергии равна $B_{12}u(\omega_{21})$. Средние же числа переходов в единицу времени соответственно равны:

$$A_{21} + B_{21}u(\omega_{21})N_2$$

и

$$B_{12}u(\omega_{21})N_1,$$

где N_2 — число частиц на уровне 2;

N_1 — число частиц на уровне 1.

Постоянные Эйнштейна A_{21} , B_{12} и B_{21} называются коэффициентами соответственно спонтанного излучения, поглощения и вынужденного излучения. В общем случае многоуровневой системы эти коэффициенты обозначают через A_{nm} , B_{mn} и B_{nm} , где индексы n и m являются це-

лыми числами, обозначающими соответствующие уровни энергии, причем здесь и далее будем предполагать, что $n > m$.

Учитывая условие равновесия, т. е. условие равенства чисел переходов $1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 1$ в единицу времени, можно записать:

$$u(\omega_{21}) B_{12} N_1 = A_{21} N_2 + u(\omega_{21}) B_{21} N_2$$

или

$$u(\omega_{21}) (B_{12} N_1 - B_{21} N_2) = A_{21} N_2.$$

Принимая во внимание, что

$$N_1 = N_2 e^{h\omega_{21}/kT},$$

находим из предыдущего соотношения:

$$u(\omega_{21}) (B_{12} e^{h\omega_{21}/kT} - B_{21}) = A_{21},$$

откуда

$$u(\omega_{21}) = \frac{A_{21}}{B_{12} e^{h\omega_{21}/kT} - B_{21}}.$$

Сравнивая это выражение с формулой Планка

$$u(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{h\omega}{e^{h\omega/kT} - 1},$$

придем к следующим соотношениям (принимая в формуле Планка $\omega = \omega_{21}$):

$$B_{12} = B_{21};$$

$$A_{21} = \frac{\omega_{21}^3 h}{\pi^2 c^3} B_{21};$$

здесь $\omega_{21}^2 / \pi^2 c^3$ — число типов колебаний (мод), приходящееся на единицу объема резонатора;

$h\omega_{21}$ — квант энергии;

B_{21} — скорость индуцированного излучения, отнесенного к единице частотного интервала.

Таким образом, вероятность спонтанного перехода A_{21} равна произведению числа мод на скорость индуцированного излучения (или поглощения) одного кванта на моду.

Обратимся еще раз к выражению

$$u(\omega_{21})B_{12}N_1 = A_{21}N_2 + u(\omega_{21})B_{21}N_2.$$

Левая часть уравнения характеризует поглощение, правая — излучение. Однако два члена правой части уравнения с физической точки зрения существенно различны. Выражение $A_{21}N_2$ относится к спонтанному излучению, имеющему хаотический характер и происходящему независимо от внешних полей. В частности, с этим видом излучения приходится иметь дело в приборах обычной некогерентной оптики.

Что же касается слагаемого $u(\omega_{21})B_{21}N_2$, характеризующего вынужденное излучение, то оно представляет для нас особый интерес, являясь основой современной когерентной квантовой электроники, использующей крайне широкий диапазон волн — от радио до оптических волн включительно.

Рассмотрим более подробно с физической точки зрения каждую из указанных выше составляющих.

1-3. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ЯВЛЕНИЙ ПОГЛОЩЕНИЯ И ИЗЛУЧЕНИЯ

При термодинамическом равновесии, как указывалось выше, излучаемая нагретым телом энергия в единицу времени в среднем равна поглощаемой энергии за тот же промежуток времени. При этом все частицы вещества распределяются по дискретным энергетическим уровням согласно известному закону Больцмана:

$$N_1 : N_2 : N_3 : \dots = e^{-E_1/kT} : e^{-E_2/kT} : e^{-E_3/kT} : \dots$$

Если $E_1 < E_2 < E_3$ и т. д., то $N_1 > N_2 > N_3$ и т. д. Числа N_1, N_2, N_3, \dots не остаются строго постоянными, что связано с вероятностями перехода в единицу времени ΔN частиц с одного уровня на другой. Эйнштейн показал, что, например, для двухуровневой системы величины $\Delta N_1/N_1$ и $\Delta N_2/N_2$ в среднем должны быть равны друг другу. Отсюда следует, что $\Delta N_1 > \Delta N_2$ и поэтому вещество в условиях термодинамического равновесия является телом, поглощающим энергию. Очевидно, интенсивность поглощения будет резко возрастать, если частота внешнего поля совпадает с одной из частот перехода, которая в свою очередь пропорциональна разности между двумя энергетическими уровнями. Акт поглощения энергии веще-

ством является вероятностным. Эта вероятность для интервала частот от ω до $\omega + d\omega$ будет пропорциональна плотности энергии поля $u(\omega_{21})d\omega$, причем коэффициент пропорциональности B_{12} характеризует вероятность возбуждения атома. Таким образом, спектральная плотность вероятности поглощения атомом энергии поля (т. е. вероятность, приходящаяся на один герц) будет равна $u(\omega_{21})B_{12}$.

Спонтанное излучение. Процесс спонтанного самопроизвольного) излучения с квантовой точки зрения можно представить в следующем виде.

Рассмотрим атом, находящийся в пространстве, свободном от каких-либо внешних полей. Для простоты будем считать, что атом может иметь лишь два энергетических уровня E_1 и E_2 причем положим, что $E_2 > E_1$. Если в момент времени t атом находится в возбужденном состоянии, т. е. на уровне E_2 , то по прошествии некоторого промежутка времени dt атом может перейти на низший уровень E_1 , причем этот переход будет сопровождаться излучением энергии, равной $E_2 - E_1$. Из самой постановки вопроса о возможности или невозможности такого излучения следует, что оно представляет собой явление случайное. Действительно, мы не можем утверждать, что в течение какого-либо единичного интервала времени излучение произойдет обязательно, а можем говорить лишь о вероятности такого события.

Вероятность спонтанного перехода системы из состояния E_2 в состояние E_1 за единицу времени (обозначаемая через A_{21}) от времени не зависит. Усложним несколько задачу, представив себе не одну частицу, а большое их количество. Пусть это будет газ, однако настолько сильно разреженный, что взаимодействием между отдельными его частицами можно пренебречь. Пусть общее число систем (атомов), участвующих в процессе, будет равно N , из них N_1 находится в состоянии E_1 , а N_2 — в состоянии E_2 . За время dt часть атомов, находящихся на высшем уровне E_2 , перейдет на низший E_1 . Число таких переходов обозначим через Δn_{21} . Здесь и в дальнейшем будем часто пользоваться дифференциальной формой записи приращения дискретных величин в силу того обстоятельства, что, например, отношение числа переходов в единицу времени Δn_{21} к общему числу потенциально возможных переходов n_{21} является величиной крайне малой, т. е. $\Delta n_{21}/n_{21} \ll 1$. Очевидно,

что dn_{21} будет пропорционально N_2 т. е.

$$dn_{21} = A_{21} N_2 dt.$$

При каждом переходе излучается энергия, равная

$$h\omega_{21} = E_2 - E_1.$$

За время dt энергия излучения будет равна:

$$h\omega_{21} dn_{21} = A_{21} N_2 h\omega_{21} dt.$$

Найдем закон убывания числа систем N_2 и определим среднее время, называемое «временем жизни», в течение которого система находится в возбужденном состоянии. Очевидно, уменьшение числа систем dN_2 на уровне E_2 за время dt будет связано с величиной числа переходов dn_{21} простой зависимостью:

$$dN_2 = -dn_{21}.$$

Таким образом, можно написать:

$$-dN_2 = A_{21} N_2 dt,$$

откуда найдем:

$$N_2 = N_2^0 e^{-A_{21}t},$$

где N_2^0 — число атомов, находящихся на уровне E_2 в момент времени $t=0$.

Энергия излучения в единицу времени, которую мы обозначим через I , будет равна:

$$I = A_{21} N_2^0 h\omega_{21} e^{-A_{21}t} = I_0 e^{-A_{21}t},$$

где $I_0 = A_{21} N_2^0 h\omega_{21}$ — интенсивность излучения в момент $t=0$.

Из последнего выражения видно, что интенсивность излучения убывает со временем по экспоненциальному закону.

Средняя продолжительность жизни в возбужденном состоянии. Большой практический интерес представляет величина средней продолжительности жизни системы (атома) в возбужденном состоянии. Это время можно вычислить на основе следующих рассуждений. Число атомов, совершивших переход с уровня E_2 на уровень E_1

за время dt , равно $A_{21}N_2dt$. Очевидно, что именно это число атомов «прожило» в возбужденном состоянии t секунд. Следовательно, сумма продолжительностей жизни всех атомов, совершивших переход $2 \rightarrow 1$ за время от 0 до неограниченно большого, будет равна:

$$\int_0^{\infty} A_{21}N_2t dt.$$

Введем понятие средней продолжительности жизни для всех атомов $\bar{\tau}$, находящихся в возбужденном состоянии в момент $t=0$:

$$\bar{\tau}N_2^0 = \int_0^{\infty} A_{21}N_2t dt$$

или

$$\bar{\tau} = \frac{\int_0^{\infty} A_{21}N_2t dt}{N_2^0}.$$

Так как

$$N_2 = N_2^0 e^{-A_{21}t},$$

то

$$\bar{\tau} = A_{21} \int_0^{\infty} t e^{-A_{21}t} dt.$$

После интегрирования придем к следующему соотношению:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{A_{21}}.$$

Таким образом, формула для интенсивности излучения может быть записана в следующем виде:

$$I = I_0 e^{-t/\bar{\tau}}.$$

Эта формула аналогична выражению для затухающих колебаний классического линейного осциллятора, для которого величина $\bar{\tau}$ носит название времени ре-

лаксации. Такое совпадение выражений с формальной стороны является неслучайным, так как, несмотря на существенные различия этих двух процессов, между ними имеется и глубокая физическая связь.

Вынужденное (индуцированное) излучение. Если при рассмотрении вопроса излучения абсолютно черного тела ограничиться двумя процессами — поглощением телом энергии и спонтанным его излучением, то условие теплового равновесия может быть записано в виде

$$u(\omega_{21})B_{21}N_1 = A_{21}N_2.$$

Однако это выражение, как было показано выше, не согласуется с формулой Планка, а следовательно, и с экспериментальными данными. Это несоответствие было устранено введением третьей компоненты — так называемого вынужденного излучения. Суть этого явления состоит в следующем.

Внешнее поле обуславливает не только поглощение энергии, но может вызвать и обратный процесс, а именно переход возбужденного атома в основное состояние с излучением при этом кванта энергии. Этот процесс при равенстве частоты внешнего поля частоте перехода, будет происходить тем вероятнее, чем ближе фаза внешнего поля к фазе излучаемой энергии. Вынужденное излучение в этом отношении аналогично тому, которое можно наблюдать у классического осциллятора: он может либо поглотить, либо излучить энергию в зависимости от соотношения фаз поля излучения и осциллятора. Такое согласованное по частоте и фазе излучение квантового осциллятора называется вынужденным или индуцированным. Его иногда называют также стимулированным излучением. Это излучение является, вообще говоря, монохроматическим (или, во всяком случае, близким к нему). При этом с увеличением интенсивности поля монохроматичность вынужденного излучения возрастает. Самым важным в процессе вынужденного излучения является то, что оно совпадает с вызвавшим его полем не только по частоте, но и по фазе, т. е. излучение является когерентным.

Таким образом, при прохождении электромагнитной волны через вещество, содержащее возбужденные системы (атомы, молекулы) и способное в силу этого к вы-

нужденному излучению, амплитуда колебания будет непрерывно нарастать, сохраняя при этом свою когерентность. В этом именно и заключается механизм уси-

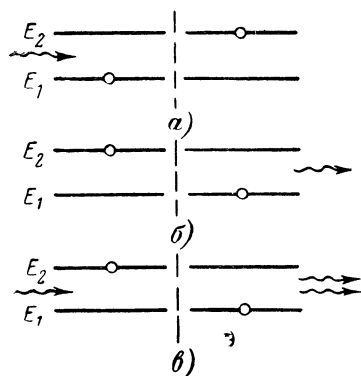


Рис. 1-7. Схематическое изображение процессов поглощения (а), спонтанного (б) и вынужденного (в) излучений.

ления, осуществляемого квантовыми приборами. При обеспечении в этих приборах положительных обратных связей режим усиления может перейти в режим автоколебаний и мы получим вместо усилителя генератор.

Акты поглощения и вынужденного излучения можно пояснить схемами на рис. 1-7. Из рисунка видно, что они количественно совпадают друг с другом, но по характеру прямо противоположны. Вот почему вынужденное излучение назы-

вают также отрицательным поглощением или усилением.

1.4. НАРУШЕНИЕ РАВНОВЕСНОГО СОСТОЯНИЯ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Условия возникновения индуцированного излучения. Так как в основе действия электронных приборов квантового типа лежит явление индуцированного излучения, рассмотрим более подробно условия, при которых оно возникает. Обратимся для этого к простейшей квантовой системе с двумя уровнями E_1 и $E_2 > E_1$. Обозначим населенность этих уровней соответственно через n_1 и n_2^* , а общее число частиц системы — через $N = n_1 + n_2$.

Пусть на данную систему воздействует сигнал, частота которого совпадает с частотой перехода, т. е.

$$\omega_0 = \omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{h}.$$

* Здесь и в дальнейшем через буквы $n(n_1, n_2 \dots)$ будем обозначать населенности уровней при динамических процессах ($n(t)$), оставляя обозначение $N(N_1, N_2 \dots)$ для случаев теплового равновесия.

При этом возможны вынужденные переходы как с нижнего уровня на верхний, так и, наоборот, с верхнего на нижний. Ранее было указано, что число переходов с нижнего уровня на верхний равно $B_{12}u(\omega_{21})n_1 = W_{12}n_1$, а с верхнего на нижний — $B_{21}u(\omega_{21})n_2 = W_{21}n_2$.

Кроме того, $B_{12} = B_{21}$ или, что то же самое, $W_{12} = W_{21}$. Очевидно, также, что переход на верхний уровень связан с поглощением энергии, а переход на нижний уровень — с ее излучением. Средний результирующий эффект будет зависеть от того, какой из указанных выше процессов будет преобладающим.

Поскольку величины $W_{12}n_1$ и $W_{21}n_2$ характеризуют числа переходов частиц в единицу времени, каждый из которых сопровождается либо поглощением, либо излучением энергии, для результирующей мощности можно написать следующее выражение:

$$P = (W_{12}n_1 - W_{21}n_2)h\omega_{21} = W_{21}\Delta n h\omega_{21},$$

где $\Delta n = n_1 - n_2$ называют разностью населенностей.

Таким образом, результирующая мощность P может иметь в зависимости от знака величины Δn положительное или отрицательное значение.

При тепловом равновесии отношение населенностей описывается известным законом распределения Больцмана

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}},$$

где через N_2 и N_1 обозначены числа n_2 и n_1 , соответствующие случаям теплового равновесия. Так как $E_2 > E_1$, следовательно, для равновесного состояния всегда $n_1 > n_2$ и разность населенностей оказывается положительной ($\Delta n > 0$). Отсюда можно сделать вывод о том, что мощность P также является положительной величиной, при этом энергия будет переходить от сигнала к системе и, следовательно, сигнал будет ослаблен.

Для того чтобы поглощающую систему превратить в излучающую, необходимо каким-либо способом вывести ее из состояния теплового равновесия, что будет соответствовать распределению частиц по уровням, обратному тому, какое имеет место в условии равновесия ($n_1 > n_2$).

В этом случае разность населенностей $\Delta n = n_1 - n_2$ и результирующая мощность P станут отрицательными величинами. Отрицательная же мощность означает, что энергия передается не от сигнала к системе, а наоборот — от системы к сигналу, в результате чего последний будет усилен.

Процесс нарушения равновесного состояния квантовой системы, обеспечивающий отрицательную разность населенностей, называют «инверсией населенностей уровней». Естественно, что после того как произведена

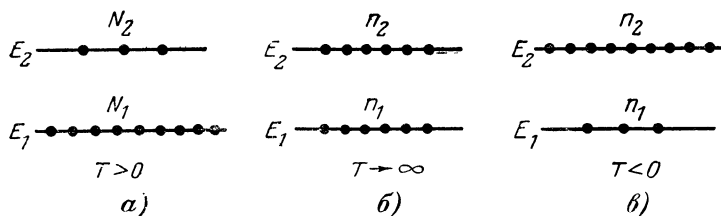


Рис. 1-8. Распределение частиц по энергетическим уровням в зависимости от температуры.

инверсия населенностей уровней, можно ожидать в любой момент времени с той или иной вероятностью обратного перехода частиц с верхнего уровня на нижний, т. е. возврата системы к устойчивому состоянию. В процессе такого перехода при определенных условиях и может произойти индуцированное излучение.

С инвертированностью уровней обычно связывают понятие отрицательной температуры.

Отрицательная температура. Классическое понятие температуры, как известно, связывается с двумя факторами: во-первых, с переходом тепла от тела с высокой температурой к телу с более низкой температурой и во-вторых, с указанным выше статистическим законом распределения Больцмана. Это распределение говорит о том, что при всех значениях температуры T число частиц на нижнем уровне всегда меньше числа частиц на верхнем уровне (рис. 1-8,а). Согласно классическим представлениям довести температуру до бесконечно большой, а тем более сделать абсолютную температуру отрицательной принципиально невозможно.

Квантовая теория расширила понятие о температуре. С точки зрения квантовых процессов понятие об отрицательной температуре приобретает определенный

смысл, и оно связывается с созданием, хотя бы временным, неравновесного состояния вещества, при котором число частиц n_2 на верхнем уровне больше числа частиц n_1 на нижнем уровне. Пользуясь законом Больцмана, представим:

$$\frac{n_2}{n_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}},$$

откуда

$$T = -\frac{E_2 - E_1}{k \ln \frac{n_2}{n_1}}.$$

Из последнего выражения видно, что условию $n_1 \geq n_2$ будет соответствовать бесконечно большая положительная температура (рис. 1-8,б), а при $n_1 \leq n_2$, оставаясь также бесконечно большой, она становится отрицательной (рис. 1-8,б). Итак, можно выделить три характерных режима системы:

1) устойчивое состояние ($n_1 > n_2$), при котором тело является поглощающим и в этом случае $T > 0$;

2) неустойчивое состояние ($n_1 < n_2$), при котором тело становится излучающим, в этом случае $T < 0$;

3) состояние насыщения ($n_1 \approx n_2$), при котором тело оказывается прозрачным (нейтральным), в этом случае $T = \pm \infty$ ($T = +\infty$, если приближаться к указанному состоянию при $n_1 - n_2 > 0$, и $T = -\infty$ при $n_1 - n_2 < 0$).

О последнем состоянии мы скажем более подробно несколько позже при рассмотрении релаксационных процессов. Таким образом, случай $n_1 < n_2$ соответствует инвертированной населенности уровней. Искусственное создание неравновесных состояний и удержание их в течение некоторого промежутка времени является одним из основных условий работы любого квантового прибора.

Очевидно, что без поступления в систему энергии извне такое состояние, как неустойчивое, с течением времени неизбежно должно перейти в равновесное, характеризующееся температурой окружающей среды. Если такой процесс является безызлучательным, то система постепенно, путем внутреннего перераспределения энергии, приходит к равновесному состоянию.

Спиновая температура. В качестве конкретного примера отрицательной температуры, создаваемой в кван-

товых приборах, можно указать на так называемую спиновую температуру, используемую в парамагнитных усилителях. Эта температура определяется ориентировкой спинов в ионах парамагнитного кристалла (например, искусственного рубина), которые могут, как известно, иметь лишь два положения в пространстве: спин может быть параллельным магнитной составляющей поля или антипараллельным ему. Инвертированность населенности в данном случае будет определяться избытком частиц, спины которых ориентированы против поля, т. е. частиц, находящихся на верхнем уровне. При этом энергетический уровень электрона расщепляется на два, вследствие чего возникают два подуровня, образующие тонкую структуру спектральной линии.

Это явление не следует смешивать с расщеплением линий вследствие известного эффекта Зеемана*, которое определяется различной ориентацией по отношению к внешнему магнитному полю не спинового, а полного момента, т. е. суммы орбитального и спинового моментов. Вектор полного момента ориентируется в пространстве таким образом, что его проекция на направление магнитного поля может принимать не два (как в случае спинового расщепления), а ряд дискретных значений. Это расщепление определяется известными квантовыми условиями $m_e h$, где $m_e = 0, \pm 1, +2, \dots, \pm l$. Для этого случая иногда вводят термин «отрицательная зеемановская температура». Пусть, например, орбитальное квантовое число $l=2$, тогда $j=l \pm s = 2 \pm 1/2$, т. е. $j=3/2$ — при антипараллельной ориентации и $j=5/2$ — при параллельной ориентации. При наличии внешнего магнитного поля каждый из этих уровней расщепляется на подуровни: первый — на четыре ($3/2; 1/2; -1/2; -3/2$); второй — на шесть ($5/2; 3/2; 1/2; -1/2; -3/2; -5/2$). Таким образом, благодаря взаимодействию между спиновыми и орбитальными моментами образуются дублеты. Очевидно, с увеличением числа электронов в атоме картина уровней будет усложняться. При этом использование понятия отрицательной (неравновесной) температуры становится все более затруднительным, так как у каждой пары уровней будет своя температура. Поэтому понятием отрицательной

* Напомним, что эффектом Зеемана называется явление расщепления энергетических уровней атома под воздействием постоянного магнитного поля.

температуры удобно пользоваться лишь при малом числе энергетических уровней.

Релаксационные процессы. Одним из важных факторов, определяющих как характер, так и эффективность работы квантовых усилителей и генераторов, являются релаксационные процессы.

Сущность этих процессов заключается в следующем. При нарушении теплового равновесного состояния системы, что связано с поглощением ею энергии внешнего электромагнитного поля и приведением ее в возбужденное состояние, система стремится возвратиться в исходное состояние. Тенденция к такому переходу и сам процесс перехода обусловлены как внутренними свойствами системы, так и теми полями, которые воздействуют на нее извне.

Релаксационные процессы сопровождаются как излучением (спонтанное излучение), так и безызлучательными переходами, связанными с рассеянием системой энергии в виде тепла.

Если отдельные составляющие общего релаксационного процесса являются независимыми друг от друга, то, обозначая через τ общее время релаксации или, иначе, постоянную времени релаксации, а через $\tau_1, \tau_2 \dots$ и т. д. времена релаксации составляющих, можно записать, что

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \dots$$

Тогда общий релаксационный процесс количественно может быть охарактеризован экспоненциальным множителем вида $e^{-t/\tau}$.

Следует отметить, что релаксация и излучение тесно связаны друг с другом. Эта связь выражается в том, что время жизни частиц в возбужденном состоянии непосредственно определяет ширину полосы частот излучаемой энергии. На величину же времени жизни влияет плотность энергии излучения, поскольку от последней зависят вероятности поглощения и индуцированного излучения. В свою очередь постоянная τ , говоря языком квантовой теории, является не чем иным, как временем жизни атома в возбужденном состоянии. Напомним, что время жизни является обратной величиной вероятности спонтанного перехода атома в равновесное

состояние за единицу времени. Действительно, обозначая последнюю через ω , выбирают единицу времени такой, при которой $\omega \ll 1$. Таким образом, через интервал времени t часть атомов, равная $n_2(1 - \omega)^t$, где n_2 — число частиц на верхнем уровне, останется в прежнем, т. е. в возбужденном состоянии. При малом ω можно воспользоваться приближенным выражением множителя

$$(1 - \omega)^t \approx e^{-\omega t}.$$

Следовательно, число атомов, остающихся в возбужденном состоянии через время t , равно $n_2 e^{-\omega t}$. Число же атомов, покидающих верхний уровень за время от t до $t + dt$, равно $\omega n_2 e^{-\omega t} dt$. Таким образом, среднее время жизни атома в возбужденном состоянии определится из выражения

$$\bar{\tau} = \frac{1}{n_2} \int_0^{\infty} t \omega n_2 e^{-\omega t} dt = \frac{1}{\omega}.$$

1-5. УСИЛЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Если расположить координатную систему так, как это показано на рис. 1-9, и считать, что фронт плоской волны (сигнала) распространяется вдоль оси x , можно написать для интенсивности сигнала выражение

$$I(\omega) = I^0(\omega) e^{-k(\omega)x},$$

где $I^0(\omega)$ — значение $I(\omega)$ при $x=0$;

$k(\omega)$ — коэффициент поглощения на частоте ω .

При равновесном состоянии $k(\omega)$ является величиной положительной; при неравновесном состоянии (в состоянии инверсии населенностей) он становится отрицательным и в этом случае представляет собой коэффициент усиления.

Количественно интегральный эффект описанного выше явления, производимый всеми активными частицами вещества, участвующими в процессе, может быть подтвержден следующим элементарным расчетом [Л. 21].

Рассмотрим вещество, представляющее собой с квантовой точки зрения двухуровневую систему. Пусть

электромагнитная волна (сигнал), имеющая весьма узкую полосу частот, заключенную между ω_{21} и $\omega_{21} + d\omega$, падает нормально на поверхность вещества, распространяясь в нем дальше в направлении оси x .

Рассмотрим прохождение волны через тонкий слой dx (рис. 1-10). Скорость движения волны в веществе равна $v = c/\eta$, где η — показатель преломления. Таким

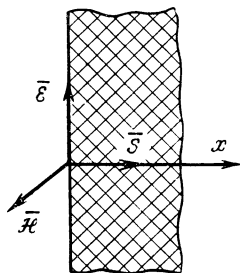


Рис. 1-9. Распространение плоской электромагнитной волны в активном веществе.

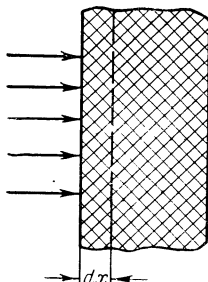


Рис. 1-10. Прохождение плоской волны через тонкий слой вещества.

образом, волна пройдет слой толщиной dx за время $dt = dx/v$.

Если через n_1 и n_2 обозначить число активных частиц соответственно на уровнях 1 и 2, то dn_1 и dn_2 будет число частиц на соответствующих уровнях, заключенных в тонком слое dx .

При прохождении волной расстояния dx интенсивность сигнала изменится на величину

$$\begin{aligned} -d[I(\omega)d\omega] &= \\ &= \hbar\omega_{21}(B_{12}dn_1 - B_{21}dn_2)I(\omega_{21})\frac{dx}{v}. \end{aligned} \quad (1-2)$$

Знак минус перед вторым членом правой части уравнения указывает на усиление сигнала вследствие вынужденного излучения. Спонтанное излучение в данном процессе не рассматривается, так как оно является не зависимым от сигнала и непосредственно не влияющим на его величину. Из (1-2) следует, что

$$-\frac{1}{I(\omega)}\frac{dI(\omega)}{dx}d\omega = \frac{\hbar\omega\eta}{c}(B_{12}dn_1 - B_{21}dn_2). \quad (1-3)$$

Обозначим $-\frac{1}{I(\omega)} \frac{dI(\omega)}{d\omega} d\omega = k(\omega)$ и проинтегрируем обе части равенства (1-3) по ω в пределах от $\omega_0 - \omega$ до $\omega_0 + \omega$.

Тогда

$$k = \int_{\omega_0 - \omega}^{\omega_0 + \omega} k(\omega) d\omega = \frac{\hbar \omega \eta}{c} (B_{12} n_1 - B_{21} n_2),$$

но

$$A_{21} = \frac{\omega^2 \hbar}{\pi^2 c^3} B_{21}; \quad B_{21} = B_{12}.$$

Поэтому

$$\begin{aligned} k &= \int_{\omega_0 - \omega}^{\omega_0 + \omega} k(\omega) d\omega = \\ &= \frac{\pi c^2 A_{21}}{2 \omega_0^2 \eta^2} (n_1 - n_2) = \kappa (n_1 - n_2), \end{aligned}$$

где

$$\kappa = \frac{\pi c^2 A_{21}}{2 \omega_0^2 \eta^2} = \text{const.}$$

Таким образом, общий эффект может быть оценен интегральным коэффициентом

$$k = \kappa (n_1 - n_2),$$

из которого отчетливо следуют три возможных случая:

1) $n_1 > n_2$ — равновесное состояние вещества, при котором сигнал, прошедший через него, ослабляется, так как при этом

$$k > 0; \quad I(x) = I_0 e^{-kx} < I_0;$$

2) $n_1 < n_2$ — неравновесное (инвертированное) состояние, при котором сигнал, прошедший через вещество, усиливается:

$$k < 0; \quad I(x) = I_0 e^{\alpha x} > I_0,$$

где $\alpha = -k$ — коэффициент усиления;

3) $n_1 = n_2$ — состояние (условие) насыщения, при котором $I(x) = I_0 = \text{const}$ и в этом случае сигнал не ослабляется, не усиливается, т. е. вещество становится как бы прозрачным.

В равновесном случае обычно $n_1 \gg n_2$, поэтому

$$\int k(\omega) d\omega \approx \kappa N,$$

где N — полное число частиц, равное в данном случае числу частиц на основном уровне, т. е. $N \approx N_1$. В этом случае коэффициент κ называют интегральным поперечным сечением на один атом.

1-6. МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ГЕНЕРАТОР

Некоторые сведения о молекулярных спектрах. Молекулы по сравнению с атомами представляют собой как в механическом, так и электрическом отношениях более сложные системы.

В качестве основного допущения при решении ряда практически важных задач предполагается, что молекула представляет собой систему, в которой имеется ряд центров, в которых располагаются ядра атомов или ионов; вокруг этих центров движутся электроны; тяжелые ядра по отношению к значительно более легким атомам считаются неподвижными.

В качестве простейшей модели обычно рассматривают двухатомную молекулу, расстояние между атомами которой остается неизменным (гантель).

Очевидно, что энергетические состояния у молекул значительно разнообразнее, чем у атомов, а потому и структура их спектральных линий получается богаче. В отличие от спектров атомов молекулярные спектры представляют собой семейства близко расположенных друг к другу спектральных линий, обычно сливающихся в общую полосу. Такая спектральная структура обуславливается не только взаимодействием электронов каждого атома в отдельности, но и взаимодействием электронов различных атомов, входящих в данную молекулу. Иными словами, здесь проявляются по сравнению с внутриатомными процессами дополнительные силы, действующие между атомами.

Для того чтобы оценить возможные энергетические состояния молекулы, необходимо определить все доступные для нее степени свободы. При этом различают внешние и внутренние движения молекулы и соответствующие им степени свободы.

К внешним движениям молекулы относится ее поступательное движение как системы в целом.

Внутренними движениями являются: вращательное движение молекулы относительно осей, проходящих через ее центр тяжести: колебательное движение молекулы, изменяющее расстояние между ядрами и, в более общем случае, возникающее за счет собственных периодических движений электронных оболочек около центров равновесия: наконец, изменение энергетического состояния атомов, приводящее к изменению потенциальной энергии молекулы.

С достаточной точностью для первого приближения можно считать, что все указанные виды движений в условиях теплового равновесия молекулы являются независимыми друг от друга.

Это позволяет представить полную энергию молекулы суммой четырех составляющих:

$$E = E_{\text{п}} + E_{\text{в}} + E_{\text{к}} + E_{\text{э}},$$

где $E_{\text{п}}$, $E_{\text{в}}$, $E_{\text{к}}$, $E_{\text{э}}$ — соответственно поступательная, вращательная, колебательная и электронная энергии.

В дальнейшем первое слагаемое общей энергии, как непосредственно не представляющее для нас интереса, из рассмотрения исключим.

Заметим также, что вращательная и колебательная энергия обязана тепловому движению и поэтому она практически исчезает при стремлении температуры к нулю.

Молекула как излучающая система представляет собой, строго говоря, мультиполь. Колебательные процессы в общем случае являются ангармоническими (т. е. периодическими, но не синусоидальными).

Это влечет за собой то, что квадрупольные электрические моменты (т. е. моменты, зависящие от квадрата расстояния между зарядами осциллятора), а также магнитные дипольные моменты во многих случаях становятся соизмеримыми с электрическими дипольными моментами или даже существенно превышающими их.

Вследствие взаимодействия электронных оболочек различных атомов, входящих в данную молекулу, происходит расщепление уровней энергии атомов. Поэтому электронные уровни молекул становятся более сложными. Они определяют электронную энергию молекулы.

Простейшая двухатомная молекула обладает одной колебательной степенью свободы и потому представляет собой квантовый гармонический осциллятор.

Для энергии такого осциллятора квантовая механика дает следующее выражение:

$$E_k = \left(v + \frac{1}{2}\right) h\omega,$$

где v — колебательное квантовое число; $v=0, 1, 2, \dots$

Вращательная энергия молекулы связана с моментом количества ее движения, который квантуется по известному закону, а именно

$$|P_J| = \sqrt{J(J+1)} h.$$

Тогда вращательная энергия может быть представлена следующей формулой:

$$E_v = \frac{P_J^2}{2I_0} = (J+1) \frac{h^2}{2I_0},$$

где I_0 — момент инерции молекулы относительно прямой, проходящей через центр тяжести и перпендикулярной оси молекулы.

В данном частном случае J называется вращательным квантовым числом, принимающим значения 0, 1, 2

Из приведенного выше следует, что у молекулы имеются три группы спектров: электронные, колебательные (вибрационные) и вращательные (ротационные).

Описанный выше спектр является весьма грубым приближением к истинному спектру молекулы. Из-за дополнительных взаимодействий между указанными выше состояниями картина будет значительно сложнее.

Разработка теории и создание первых образцов молекулярного генератора были осуществлены в 1954 г. одновременно Басовым и Прохоровым в СССР и Гордоном, Цейгером и Таунсом в США.

В качестве активных частиц были использованы молекулы газа аммиака (NH_3). Следует подчеркнуть, что многочисленные исследования спектров поглощения газообразным аммиаком в области СВЧ положили нача-

ло радиоспектроскопии и квантовой электроники. Таким образом, этот газ приобрел в указанных областях примерно такое же «эталонное» значение, какое получил в квантовой механике атом водорода. Этому благоприятствовало и то обстоятельство, что спектральные линии поглощения аммиака занимают крайне широкий

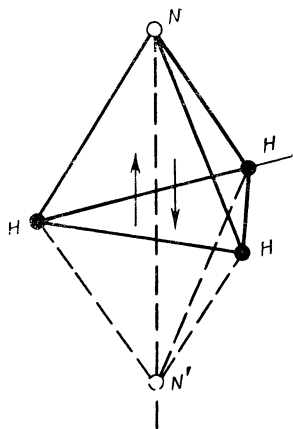


Рис. 1-11. Структура молекулы аммиака.

диапазон частот (примерно от 5 до 300 Гц) и обладают большой интенсивностью.

Молекула аммиака имеет вид правильной пирамиды (рис. 1-11), в вершине которой помещается атом азота, а в вершинах треугольника, образующего основание, находятся атомы водорода.

Атом азота может оказываться как по одну, так и по другую сторону основания.

Молекула аммиака представляет собой сложную механическую систему с большим числом степеней свободы, подчиняющуюся законам квантовой физики. Однако

в каждом частном случае нет необходимости принимать во внимание все многообразие ее движений. Следует учитывать лишь те, которые играют непосредственную роль в работе данного молекулярного генератора. В рассматриваемом случае таким движением является вращение атомов водорода вокруг оси симметрии, проходящей через центр тяжести молекулы, перпендикулярно плоскости расположения атомов водорода. Такими вращательными уровнями особенно богат спектр аммиака. Однако в данном молекулярном генераторе используются не эти уровни, а те, которые получаются вследствие их расщепления за счет так называемого инверсионного колебания атома азота относительно плоскости $H-H-H$.

Переходы между расщепленными уровнями связаны с явлением туннельного эффекта, объясняемого, как известно, только на основе квантовой теории. Если вращательные движения отвечают переходам, порождающим излучение в инфракрасной области, то с инверсионными

колебаниями связано излучение в области СВЧ. В частности, один из таких переходов, используемых в молекулярном генераторе, соответствует приблизительно частоте $2,4 \cdot 10^{10}$ гц.

Разделение молекулярного пучка. Основным условием работы молекулярного генератора является пространственное разделение молекулярного пучка на два, обладающих различными энергиями. Такое разделение (сортировка) частиц производится с помощью неоднородного электрического поля. Неоднородное электрическое поле нарушает распределение заряда в молекуле, индуцируя в ней дипольный момент. Такое явление известно под названием квадратичного эффекта Штарка. Если электрический диполь с произвольной ориентацией его момента поместить в однородное электрическое поле, то диполь будет испытывать вращающий момент до тех пор, пока не станет параллельным силовым линиям поля. При этом энергия взаимодействия будет наименьшей, равной $U_{\text{мин}} = -p\mathcal{E}_0$, что соответствует положению устойчивого равновесия. В этом выражении p — абсолютное значение дипольного момента молекулы, а \mathcal{E}_0 — максимум напряженности электрического поля. Если же поле неоднородно, то энергия взаимодействия даже при параллельной ориентации момента будет наименьшей лишь в том случае, если диполь окажется в максимуме напряженности поля (рис. 1-12,а). Таким образом, устойчивым является именно это положение, во всяком другом — диполь будет испытывать, кроме вращательного, еще и поступательное движение.

Противоположная картина получится в том случае, если момент диполя будет антипараллельным полю, при котором энергия будет наибольшей и равной $U_{\text{макс}} = p\mathcal{E}_0$. Оставаясь в этом положении, диполь будет испытывать силу, заставляющую его перемещаться в сторону минимальной напряженности поля (рис. 1-12,б).

Считаем уместным здесь отметить, что аналогичные рассуждения полностью применимы и к магнитным диполям, для которых энергия взаимодействия с полем равна $U = -\mu_0 B_0$.

Возбужденные и невозбужденные молекулы, находящиеся соответственно на верхнем и нижнем уровнях, аналогичны двум указанным выше положениям диполей. Если такие молекулы попадут в неоднородное элек-

трическое поле, то, очевидно, произойдет их рассортировка по уровням. Этот процесс в молекулярном генераторе производится с помощью специального квадрупольного конденсатора.

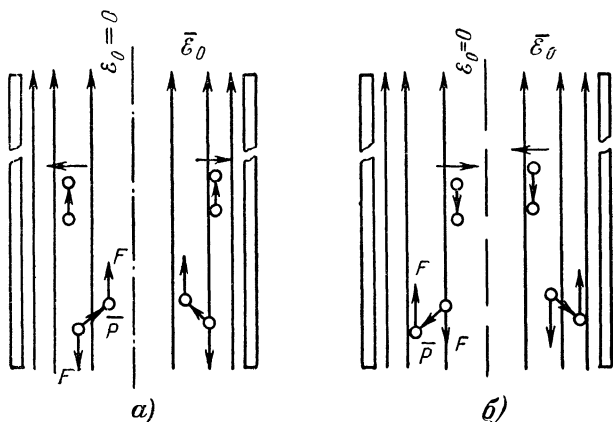


Рис. 1-12. Электрический диполь в неоднородном электрическом поле.

польного конденсатора (селектора). Он представляет собой систему четырех (или шести) параллельных стержней, каждый из которых имеет заряд, равный по величине, но обратный по знаку заряду соседнего с ним

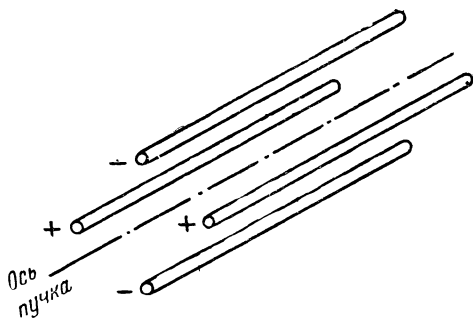


Рис. 1-13. Квадрупольный конденсатор (селектор).

стержня (рис. 1-13). Благодаря такому распределению зарядов создается неоднородное поле — максимальное у стержней и минимальное (практически нулевое) в центре системы. Молекулярный пучок, попавший в такое

устройство, будет разделен на два: вдоль оси селектора будут концентрироваться молекулы с высокой энергией, а молекулы с низкой энергией будут оттеснены к стержням. Таким образом, вдоль оси конденсатора будет двигаться пучок лишь возбужденных молекул, которые направляются затем в резонатор. Основная частота резонатора выбирается равной частоте перехода молекул с верхнего уровня на нижний. Схема молекулярного генератора приведена на рис. 1-14.

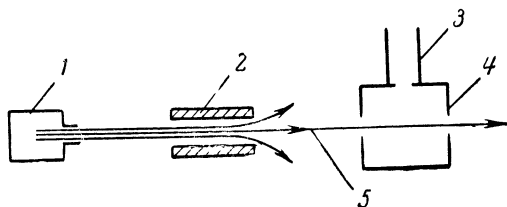


Рис. 1-14. Схема молекулярного генератора.

1 — источник молекул; 2 — селектор; 3 — волновод;
4 — резонатор; 5 — молекулярный пучок.

Полоса частот. С увеличением напряженности поля интервал между энергетическими уровнями возрастает (рис. 1-15). Усиление поля в резонаторе будет происходить до тех пор, пока излучаемая молекулами мощность будет превосходить мощность потерь. При обеспечении в резонаторе положительных обратных связей (путем использования в резонаторе явления отражения волн) режим усиления при определенных условиях может перейти в режим автоколебаний. Колебания при этом будут нарастать до тех пор, пока мощность излучения не станет равной сумме мощности, отводимой в волновод, и мощности потерь. Это произойдет при наступлении явления насыщения.

Величина излучаемой мощности зависит от плотности молекулярного пучка. Чем больше плотность последнего, тем больше и мощность излучения. С увеличением плотности пучка растет коэффициент усиления, причем этот рост теоретически ничем не ограничен.

Одновременно с этим полоса генерируемых частот будет непрерывно сужаться. Релаксационные явления, обычно обуславливающие расширение спектральной линии, такие как соударение молекул друг с другом или со стенками резонатора, здесь практически отсутствуют.

Что касается спонтанных излучений, то они не наблюдаются вследствие того, что вероятность такого события за время пролета молекулы через резонатор, т. е. за время $t=l/v$, практически равна нулю.

Таким образом, ширина полосы в данном случае обуславливается лишь временем пролета молекул через резонатор, т. е. полосой

$$\Delta\omega = 2\pi \frac{\bar{v}}{l},$$

где \bar{v} — средняя скорость молекул в резонаторе;

l — длина резонатора.

При длине резонатора 10 см полоса частот составляет всего лишь 6 кГц. Ввиду того что на молекулярную систему, особенно при сильном охлаждении ее, окружающая среда влияет крайне незначительно, могут быть получены генераторы и усилители с весьма высокими показателями.

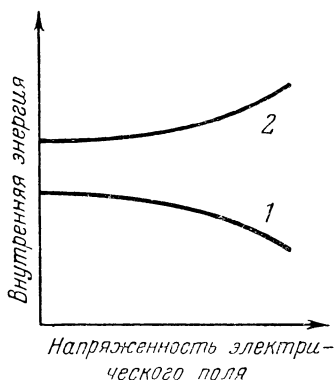


Рис. 1-15. Зависимость энергетических уровней молекулы аммиака от напряженности электрического поля.

Так, например, секундная нестабильность молекулярного генератора $\Delta f/\dot{f}_0$ оценивается величиной порядка $4 \cdot 10^{-12}$ при мощности около 10^{-10} вт. Что же касается молекулярного усилителя, то с точки зрения шумовых характеристик он приближается в силу указанных выше причин к идеальному ($F_{ш} \approx 1$).

Малый коэффициент шума объясняется тем, что в рассматриваемом процессе участвуют нейтральные частицы, хаотическое движение которых не вызывает каких-либо электромагнитных эффектов. Поэтому на сигнал, вводимый в резонатор, накладываются лишь тепловые шумы стенок резонатора. Следует отметить, что, несмотря на крайне низкую шумовую температуру, усилитель, построенный по указанному выше принципу, обладает и существенными недостатками, а именно: необычайно узкой полосой пропускания и трудностью осуществления перестройки по частоте. Вследствие этого практическое использование усилителя весьма ограни-

чено, и он может рассматриваться лишь как узкополосный усилитель СВЧ резонансного типа с фиксированной настройкой.

1-7. ПАРАМАГНИТНЫЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ РЕЗОНАНС

Прежде чем приступить к описанию парамагнитного усилителя, остановимся на некоторых принципиально важных вопросах, связанных с работой такого усилителя.

Условия возникновения явления парамагнитного резонанса. Явление парамагнитного электронного резонанса наблюдается при наложении на парамагнитное вещество двух взаимно перпендикулярных магнитных полей: сильного постоянного и слабого магнитного поля такой частоты, при которой наступает наиболее интенсивное поглощение энергии этого поля. Теоретически возможность такого явления была предсказана Дорфманом еще в 1923 г., а экспериментально оно было открыто в 1944 г. Е. К. Завойским.

Резонансная частота, при которой происходит резкое селективное поглощение, оказывается равной частоте Лармора $\omega_L = \frac{e}{2m_s} B_0$. Это явление наблюдается в тех случаях, когда вещество имеет неспаренные (нескомпенсированные) электронные спины. Это относится к атомам тех элементов, у которых результирующий собственный магнитный момент электронов некоторых оболочек отличен от нуля. Как известно, такие атомы обладают постоянным магнитным дипольным моментом и поэтому способны вступать во взаимодействие с внешним магнитным полем. В частности, указанным свойством обладают электроны атомов щелочноземельной группы. Однако водородоподобные атомы как магнитные системы являются неустойчивыми. Объясняется это тем, что неспаренные электроны, дающие отличный от нуля магнитный дипольный момент, находятся только во внешней оболочке, т. е. являются валентными и вследствие этого способными терять это свойство при химических соединениях.

Иначе обстоит дело с элементами других переходных групп — группы железа (никель, кобальт, хром и др.) и группы редкоземельных элементов (лантан, неодим, самарий, европий, гадолиний и др.), а также

соединений лантана с алюминием или медью, называемых лантанидами. Магнитная устойчивость этих элементов объясняется тем, что большая часть неспаренных электронов находится не во внешней, а во внутренних оболочках, не участвующих в химических реакциях.

Такие элементы известны под названием парамагнетиков и ферромагнетиков. Достаточно распространенными парамагнитными материалами являются кристаллы, содержащие связанные атомы элементов группы железа.

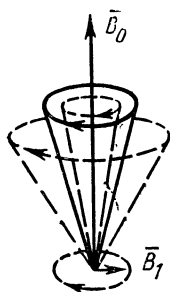


Рис. 1-16. Прецессия электрона при парамагнитном резонансе.

Сущность явления парамагнитного резонатора. Явление парамагнитного резонанса с точки зрения классической физики можно пояснить следующим образом. Предположим, что внешнее электромагнитное поле, в котором находится парамагнитный кристалл, имеет круговую поляризацию, причем вектор магнитной индукции поля \mathbf{V}_1 вращается в плоскости, перпендикулярной направлению вектора постоянного магнитного поля \mathbf{V}_0 . Рассмотрим случай, когда вращение вектора \mathbf{V}_1 совпадает

по направлению с прецессионным вращением вектора μ_j , являющегося суммой орбитального и спинового магнитных моментов. При этом частота переменного поля отличается от частоты прецессии ($\omega \neq \omega_L$). При частоте переменного поля $\omega \neq \omega_L$ будет происходить то ускорение, то замедление прецессии электрона, так как результирующее поле в каждый момент времени определяется мгновенным значением геометрической суммы двух полей \mathbf{V}_0 и \mathbf{V}_1 (рис. 1-16). При этом среднее значение дополнительного вращательного момента будет равно нулю. При совпадении частоты переменного поля с частотой прецессии спинов ($\omega = \omega_L$) появится постоянно действующий на спины опрокидывающий момент. Действие этого момента выражается в возникновении дополнительных колебаний, накладываемых на основную прецессию спинов. При этом создаются условия, при которых резко возрастает внутренняя энергия атома за счет энергии взаимодействия между его спинами и внешним переменным полем.

Если вектор \mathbf{V}_1 будет вращаться в обратную сто-

рону по отношению к вращению магнитного момента μ_j , вызванного прецессией, то, очевидно, результирующий эффект в среднем, независимо от соотношения частот поля и прецессии, также будет равен нулю, как и при несовпадении частот в первом случае.

С квантовой точки зрения рассмотренный выше процесс может быть описан следующим образом.

Как известно, собственный магнитный момент электрона равен одному магнетону Бора

$$|\bar{\mu}_B| = \frac{he}{2m_0}.$$

Энергия взаимодействия электрона с внешним полем \mathbf{B}_0 равна:

$$U = -\bar{\mu}_B \mathbf{B}_0.$$

Принимая во внимание, что этот момент может иметь два знака ($+\mu_B$ и $-\mu_B$), при которых он либо совпадает с вектором \mathbf{B}_0 , либо ему противоположен, основной уровень расщепится на два:

$$U_{\text{макс}} = E + \mu_B B_0; \quad U_{\text{мин}} = E - \mu_B B_0.$$

Переходу между этими уровнями соответствует частота

$$\omega_{21} = \frac{(E + \mu_B B_0) - (E - \mu_B B_0)}{h} = \frac{2\mu_B}{h} B_0.$$

Таким образом, условию парамагнитного резонанса (сильного селективного поглощения) отвечает равенство частоты ω внешнего поля \mathbf{B}_1 частоте перехода ω_{21} :

$$\omega = \omega_{21} = \frac{2\mu_B B_0}{h} = \frac{e}{m_0} B_0 = \gamma_s B_0,$$

где γ_s — гиромагнитное число для спиновых моментов.

Если в это выражение подставить известные величины (e , m_0 , c), то придем к удобной для практического использования формуле следующего вида:

$$\omega \approx 17,6 H_0, \text{ Мгц, где } H_0 \text{ — в эрстедах.}$$

1-8. РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В ПАРАМАГНИТНЫХ КРИСТАЛЛАХ

В квантовых усилителях, использующих в качестве активного вещества кристаллические парамагнитные тела, особо важную роль играют релаксационные про-

цессы. Если молекулы газообразного аммиака по своим резонансным свойствам можно сравнить с одиночными колебательными контурами, обладающими весьма высокой добротностью, и если взаимосвязь между ними практически равна нулю, то частицы твердого парамагнитного вещества следует уподобить системе сильно связанных контуров, резонансная кривая которой напоминает частотную характеристику полосового фильтра. Использование этого свойства твердого парамагнетика, и привело к созданию широкополосного квантового усилителя. Ширина спектральной линии обусловлена рядом факторов, основными из которых являются взаимодействие спинов с решеткой кристалла и спинов между собой. Эти взаимодействия приводят, во-первых, к расщеплению уровней и, во-вторых, к расширению полосы спектральной линии. Поясним сказанное.

К атому парамагнитного вещества можно применять схему связи LS .

Напомним сущность этой схемы.

Пусть \mathbf{l}_i и \mathbf{s}_i — соответственно орбитальный и спиновый моменты i -го электрона в атоме, а \mathbf{L} и \mathbf{s} — те же моменты атома как единой системы.

Согласно схеме LS -связи при переходе от рассмотрения атома как коллектива из электронов к атому как к целому, складывают отдельно орбитальные моменты и отдельно спиновые моменты, т. е. полагают:

$$\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{l}_i \text{ и } \mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i.$$

Очевидно, что раздельное сложение возможно только в случае слабого взаимодействия между орбитальными и спиновыми моментами каждого электрона в атоме. Как показывает опыт, такое предположение оказывается справедливым для многих сложных атомов. По этой схеме абсолютное значение полного орбитального момента равно:

$$|\mathbf{P}_L| = \sqrt{L(L+1)}h,$$

а его проекции на ось

$$P_{Lz} = Mh,$$

где L и M — квантовые числа сложного атома.

Под влиянием внешнего магнитного поля и внутри-кристаллических полей происходит расщепление уровней на $2L + 1$ подуровней.

Число проекций (согласно схеме LS) полного спинового момента составляет, как известно, $2S + 1$ значение.

Возвращение возбужденных атомов в основное состояние характеризуется двумя видами релаксационных процессов: спин-решеточным и спин-спиновым.

Спин-решеточное взаимодействие. Спин-решеточное взаимодействие обусловлено взаимодействием спинов с полем кристаллической решетки. Малые колебания атомов в кристаллах могут быть представлены в виде волн, распространяющихся в кристалле. Эти волны квантовая теория представляет также в виде квазичастиц — фононов. В данном случае имеет место такое же сопоставление звуковых волн квазичастицам — фононам, как и в случае электромагнитных волн, сопоставляемых частицам-фотонам. Тепловые колебания решетки играют ту же роль по отношению к возбужденным спинам, что и внешнее электромагнитное поле: фононное поле решетки стимулирует релаксационные переходы, которые могут происходить в обе стороны, т. е. спин под таким воздействием может либо излучить квант энергии, либо, наоборот, поглотить его.

Кроме того, на вынужденные релаксационные переходы накладываются не зависящие от поля решетки спонтанные безызлучательные переходы (подобно тому как это имеет место при взаимодействии спиновой системы с внешним электромагнитным излучением).

Взаимодействие спинов с полем решетки приводит к выравниванию спиновой температуры и температуры решетки, в результате чего спины переходят с верхнего уровня на нижний.

Кинетические уравнения Эйнштейна. Остановимся на рассмотрении релаксационных процессов несколько подробнее, обратившись для этого к так называемым кинетическим уравнениям Эйнштейна [Л. 28].

По аналогии с вынужденным излучением релаксационные переходы характеризуют вероятностями их осуществления за единицу времени. Эти вероятности обозначают через w_{12} и w_{21} соответственно для переходов вверх и вниз, т. е. с поглощением или излучением спин-кванта энергии. Числа переходов за единицу времени очевидно будут равны $w_{12}n_1$ и $w_{21}n_2$, где через n_1 и n_2

обозначены числа спинов соответственно на нижнем и верхнем уровнях.

Если ограничиться рассмотрением лишь спин-решеточной релаксации, то уравнения, характеризующие скорость изменения во времени населенности уровней 1 и 2, запишутся в следующем виде:

$$\frac{dn_1}{dt} = -\omega_{12}n_1 + \omega_{21}n_2;$$

$$\frac{dn_2}{dt} = \omega_{12}n_1 - \omega_{21}n_2.$$

Несмотря на дискретность значений n_1 и n_2 , рассмотрение их как непрерывных функций времени вполне допустимо в силу огромного числа одновременно участвующих в процессе спинов (порядка 10^{20} в 1 см^3).

Следует отметить, что приведенные уравнения удовлетворяют, во-первых, требованию постоянства общего числа частиц $N = n_1 + n_2$, что непосредственно следует из равенства $\frac{d(n_1 + n_2)}{dt} = 0$, откуда $n_1 + n_2 = N$, и, во-

вторых, в условиях теплового равновесия спиновой системы, закону распределения Больцмана:

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}}.$$

Пользуясь написанными выше уравнениями для случая теплового равновесия, при котором $n_1 = N_1$ и $n_2 = N_2$, приходим к важному соотношению:

$$\frac{\omega_{12}}{\omega_{21}} = \frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}}.$$

Это соотношение говорит о том, что в данных условиях вероятность релаксационного перехода сверху вниз всегда превосходит вероятность обратного перехода, т. е. $\omega_{21} > \omega_{12}$.

Вычитая второе уравнение ранее приведенной системы из первого, получаем кинетическое уравнение для разности населенностей $\Delta n = n_1 - n_2$:

$$\frac{d(\Delta n)}{dt} = 2(\omega_{21}n_2 - \omega_{12}n_1).$$

Пользуясь соотношениями:

$$n_1 + n_2 = N;$$

$$\frac{\omega_{12}}{\omega_{21}} = \frac{N_2}{N_1},$$

уравнение можно переписать в следующем виде:

$$\frac{d(\Delta n)}{dt} = -(\Delta n + \Delta N)(\omega_{12} + \omega_{21}),$$

где $\Delta N = N_1 - N_2$.

Если положить $\omega_{12} \approx \omega_{21}$, то решением уравнения явится следующая функция времени:

$$\Delta n(t) = \Delta N + (\Delta n_0 - \Delta N)e^{-(\omega_{12} + \omega_{21})t}.$$

Постоянные ΔN и Δn_0 определяются из физических условий задачи и представляют собой: Δn_0 — значение Δn при $t=0$, а $\Delta N = N_1 - N_2$ — разность населенностей при тепловом равновесии спиновой системы.

Данное решение показывает, что приближение системы к равновесному состоянию происходит по экспоненциальному закону с характеристическим временем:

$$\tau_1 = \frac{1}{\omega_{12} + \omega_{21}}.$$

Таким образом, спин-решеточное взаимодействие приводит к выравниванию спиновой температуры системы спинов и температуры колебательного движения решетки.

Согласно опытным данным диапазон возможных значений крайне велик. Он охватывает величины от долей микросекунды до нескольких секунд и даже больше.

Время τ_1 сильно зависит от температуры решетки, заметно возрастая с ее уменьшением.

Описанный выше процесс называют иногда термическим релаксационным процессом, а τ_1 — термическим временем релаксации. Термин «спин-решеточная релаксация» обычно применяют в отношении парамагнитных кристаллических веществ, т. е. таких, в которых частично упорядоченные, благодаря возбуждению, магнитные моменты стремятся вернуться к своей равновесной (т. е. беспорядочной) ориентации. Для нормальной работы

квантовых приборов избыток населенностей на верхнем уровне следует удерживать как можно дольше, т. е. время релаксации τ_1 должно быть большим, что обычно и имеет место на практике. Таким образом, на ширину линии этот вид релаксации практически не оказывает большого влияния.

Кинетические уравнения при наличии внешнего поля. Выше мы рассматривали чистый релаксационный процесс спиновой системы, обусловленный ее взаимодействием с полем кристаллической решетки. Поэтому в кинетическое уравнение входили члены, отображающие лишь этот процесс.

Предположим теперь, что рассматриваемая система находится под воздействием внешнего электромагнитного поля (сигнала), частота которого ω_0 равна или очень близка частоте перехода ω_{21} . В этом случае возможны вынужденные переходы, характеризующиеся вероятностями W_{12} и W_{21} .

С учетом этого дополнительного взаимодействия кинетические уравнения приобретут вид:

$$\begin{aligned}\frac{dn_1}{dt} &= -\omega_{12}n_1 + \omega_{21}n_2 - W_{12}n_1 + W_{21}n_2; \\ \frac{dn_2}{dt} &= \omega_{12}n_1 - \omega_{21}n_2 + W_{12}n_1 - W_{21}n_2.\end{aligned}$$

Учитывая, что $W_{12} = W_{21}$, кинетическое уравнение для разности населенностей можно записать в следующем виде:

$$\frac{d(\Delta n)}{dt} = -(\Delta n - \Delta N)(\omega_{12} + \omega_{21}) - 2W_{12}\Delta n.$$

Заметим, что неравенство вероятностей ω_{12} и ω_{21} в отличие от W_{12} и W_{21} объясняется тем, что при рассмотрении спин-решеточной релаксации не производилось деления процесса на вынужденные и спонтанные переходы, как это делалось для процессов взаимодействия системы с внешним электромагнитным полем, и равенство $W_{12} = W_{21}$ относится лишь к одному виду перехода — вынужденному.

Поэтому, если учесть еще и вероятность спонтанного излучения, характеризующуюся коэффициентом A_{21} , кинетическое уравнение для разности населенностей уров-

ней должно быть записано в следующем виде:

$$\frac{d(\Delta n)}{dt} = -(\Delta n - \Delta N)(w_{12} + w_{21}) - 2W_{12}\Delta n - 2A_{21}\Delta n.$$

Заметим, однако, что последний член в правой части уравнения для рассматриваемого случая весьма мал и практически не играет никакой роли.

Насыщение уровней. Перейдем теперь к вопросу о так называемом насыщении уровней, играющем большую роль в теории квантовых приборов.

Поведение квантовой системы будет существенно зависеть от интенсивности сигнала. Если на спиновую систему подействовать весьма мощным сигналом, то будут наблюдаться явления, которые можно уяснить из анализа выведенного ранее уравнения:

$$\frac{d(\Delta n)}{dt} = -(\Delta n - \Delta N)(w_{12} + w_{21}) - 2W_{12}\Delta n.$$

Первый член правой части уравнения характеризует релаксационный процесс; второй — вынужденные переходы. Следует напомнить, что вероятность W_{12} пропорциональна спектральной плотности энергии приходящего сигнала $u(\omega)$ ($W_{12} = B_{12}u(\omega)$). Поэтому при сильных сигналах, когда $W_{12} \gg w_{12} + w_{21}$, разность Δn будет уменьшаться, т. е. населенности n_1 и n_2 уравниваются. Релаксационные процессы, наоборот, стремятся сделать эту разность как можно ближе к разности ΔN , соответствующей тепловому равновесию. Обе эти тенденции ясны из физических соображений, так как при всех условиях динамический процесс, связанный с изменением во времени разности Δn , стремится к определенному постоянному пределу, при котором

$$\frac{d\Delta n}{dt} = 0.$$

При этом условии

$$\Delta n_{\text{стац}} = \frac{\Delta N}{1 + 2W_{12}\tau_1},$$

где

$$\tau_1 = \frac{1}{w_{12} + w_{21}}.$$

При весьма слабых сигналах

$$\Delta n_{\text{стац}} \approx \Delta N,$$

т. е. будет мало отличаться от разности населенностей, соответствующей тепловому равновесию.

При очень сильных сигналах, при которых $W_{12} \gg 1/\tau$, наступит режим насыщения и $\Delta n_{\text{стац}} \rightarrow 0$, т. е. $n_1 = n_2$.

Систему, находящуюся в таком состоянии называют «насыщенной».

Из выражения для $\Delta n_{\text{стац}}$ в общем случае следует, что зависимость между ΔN и $\Delta n_{\text{стац}} = \Delta n_{\text{стац}}(W_{12})$ является нелинейной. Насыщение, обусловленное процессом выравнивания населенностей уровней, непосредственно связано с уменьшением квантового усиления, т. е. уменьшением отношения интенсивности усиленного системой сигнала к интенсивности первичного сигнала (неусиленного).

Спин-спиновое взаимодействие. Этот вид релаксационных процессов, получивших название спин-спиновых, обусловлен взаимодействием между отдельными спинами. Этот процесс характеризуется тем, что хотя внутренняя энергия системы при этом остается неизменной, внутренняя когерентность спиновых колебаний нарушается. С точки зрения статистической механики можно говорить о спин-спиновой релаксации как о переходном процессе от частично упорядоченного состояния спинов к полностью упорядоченному, т. е. состоянию, обладающему минимальной энергией. Под упорядоченным состоянием в данном случае следует понимать спины возбужденных атомов, способные к индуцированному излучению. Этот вид релаксации связан с дипольным взаимодействием между спинами. Физически это означает, что каждый спин находится не только во внешнем магнитном поле \mathbf{B} , но и местном (локальном) поле $\mathbf{B}_{\text{мест}}$, создаваемом магнитными моментами соседних спинов, т. е. в поле $\mathbf{B} + \mathbf{B}_{\text{мест}}$. Это поле изменяется от спина к спину и зависит как от расположения атомов в решетке, так и от магнитного квантового числа. Время спин-спинового взаимодействия обозначают обычно через τ_2 . Эта величина служит для описания времени жизни спина или, иначе, его «фазовой памяти». Физически это означает, что при переходе спина из положения с антипараллельной ориентацией в положение с параллельной излучаемый квант энергии в виде монохромати-

ческой волны может иметь либо вполне определенную, либо случайную фазу по отношению к фазе излучения других спиновых переходов. Иными словами, при потере фазовой памяти вероятность индуцированного излучения снижается, а интенсивность спонтанного излучения увеличивается. Спин-спиновое взаимодействие, связанное с утратой когерентности, является одной из причин, влекущих за собой расширение спектральных линий.

Блумберген, Парселл и Паунд установили простую зависимость между постоянной τ_2 и шириной спектральной линии.

Эта зависимость выводится, исходя из следующих соображений. Если частота сигнала ω_0 , воздействующего на спиновую систему, несколько отличается от частоты перехода ω_{21} , то значение вероятности $W_{12} = W_{21}$ падает.

Уменьшение этой величины учитывается с помощью функции $g(\omega)$, являющейся известной лоренцовой кривой, которая обычно нормируется так, чтобы

$$\int_0^{\infty} g(\omega) d\omega = 1.$$

Для аналитического выражения функции $g(\omega)$ используют следующее выражение, называемое «лоренцовой формой линии»:

$$g(\omega) = \frac{2\tau_2}{1 - \tau_2^2 (\omega - \omega_0)^2},$$

где τ_2 — время спин-спиновой релаксации.

Максимальное значение этой функции равно:

$$g(\omega_0) = 2\tau_2,$$

откуда

$$\tau_2 = \frac{1}{2} g(\omega_0).$$

Это и есть соотношение, предложенное указанными выше авторами.

Таким образом, можно сказать, что так называемую естественную ширину спектральной линии определяют в основном спин-спиновые релаксационные процессы.

Для ослабления влияния этого вида релаксации используют так называемое «магнитное разбавление». Оно производится с помощью немагнитного материала, наличие которого в магнитном веществе удаляет друг от друга спины, ослабляя таким образом связь между ними. Примером такого разбавления может служить, в частности, кристалл корунда Al_2O_3 , называемый сапфиром, в решетку которого вкрапливаются ионы (трехкратно ионизированные атомы) хрома Cr^{3+} . Процент содержания хрома по отношению к основному веществу колеблется в пределах от 0,03 до 0,3%, придавая корунду специфический красный цвет (от розового до темно-красного), что и послужило основанием назвать такой кристалл рубином. Искусственный (синтетический) рубин (Al_2O_3 , Cr_2O_3) является в настоящее время одним из основных веществ, используемых в квантовых приборах на твердом теле.

Уравнения Блоха для релаксационных процессов. Блох при исследовании явления ядерного магнитного резонанса назвал спин-решеточную релаксацию продольной, а спин-спиновую — поперечной релаксацией; им соответствуют времена релаксации τ_1 и τ_2 .

На основе исследований Блох пришел к некоторым уравнениям для комплексного вектора намагничивания вещества \mathbf{M} как функции времени. Вывод этих уравнений построен на классических макроскопических представлениях явления парамагнитного резонанса.

Известно, что связь между дипольным магнитным моментом $\bar{\mu}$, магнитным полем \mathbf{B}_0 и механическим моментом \mathbf{p} определяется уравнением следующего вида:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \bar{\mu} \times \mathbf{B}. \quad (1-4)$$

Принимая во внимание, что между механическим и магнитным моментами электрона существует простое соотношение

$$\frac{|\bar{\mu}|}{|\mathbf{p}|} = \gamma,$$

запишем уравнение (1-4) в следующем виде:

$$\frac{d\bar{\mu}}{dt} = \gamma (\bar{\mu} \times \mathbf{B}). \quad (1-5)$$

Если $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 = \text{const}$, то $\bar{\mu}$ процессирует относительно \mathbf{B}_0 с угловой скоростью (с угловой частотой Лармора) $\omega_L = \gamma B_0$, в связи с чем уравнение (1-5) примет следующий вид:

$$\frac{d\bar{\mu}}{dt} = \gamma (\bar{\mu} \times \bar{\omega}_L).$$

Распространив полученный результат на весь ансамбль частиц, участвующих в рассматриваемом процессе, получим уравнение для объемной плотности магнитных моментов (вектора намагничивания \mathbf{M});

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \gamma (\mathbf{M} \times \mathbf{B}_0).$$

Не ограничиваясь частным случаем, когда поле $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0$ постоянно, напомним:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \gamma (\mathbf{M} \times \mathbf{B}), \quad (1-6)$$

где $\mathbf{B} = \mathbf{B}(t)$.

Напомним, что вектор \mathbf{M} связан с вектором \mathbf{B} соотношением

$$\mathbf{M} = \kappa_m \mathbf{B} = \kappa_m \mu_0 \mathbf{H},$$

где κ_m — коэффициент магнитной восприимчивости;
 μ_0 — магнитная проницаемость вакуума.

Представим себе, что частицы находятся одновременно как в постоянном \mathbf{H}_0 , так и переменном поле \mathbf{H}_1 . Пусть переменное электромагнитное поле будет обладать такой круговой поляризацией, что для составляющих \mathbf{H}_1 можно написать:

$$H_{1x} = H_1 \cos \omega t; \quad H_{1y} = H_1 \sin \omega t.$$

Релаксационные процессы при наличии лишь постоянного поля \mathbf{H}_0 , ориентированного вдоль оси Oz , удовлетворяют уравнениям, дающим известные экспоненциальные решения:

$$\frac{dM_x}{dt} = -\frac{M_x}{\tau_2}; \quad \frac{dM_y}{dt} = -\frac{M_y}{\tau_2}; \quad \frac{dM_z}{dt} = \frac{M_0 - M_z}{\tau_1},$$

где M_0 — абсолютное значение постоянного магнитного момента, $M_0 = \kappa_0 \mu_0 H_0$, κ_0 — статистическая магнитная восприимчивость.

При наличии переменного поля с указанной ранее ориентацией составляющих получим, используя уравнение (1-6), следующие уравнения для проекций \mathbf{M} :

$$\frac{dM_x}{dt} = \gamma (M_y H_0 + M_z H_1 \cos \omega t) - \frac{M_x}{\tau_2};$$

$$\frac{dM_y}{dt} = \gamma (M_z H_1 \cos \omega t - M_x H_0) - \frac{M_y}{\tau_2};$$

$$\frac{dM_z}{dt} = \gamma (-M_x H_1 \cos \omega t - M_y H_1 \sin \omega t) + \frac{M_0 - M_z}{\tau_1}.$$

На основе решения этих уравнений можно получить выражение для мощности индуцированного излучения на частоте ω :

$$P_\omega = H_1^2 \chi_0 \omega_0^2 g(\omega),$$

где

$$g(\omega) = \frac{\tau_2^{-1}}{(\omega - \omega_0)^2 + \tau^{-2} + \gamma^2 H_1^2 \frac{\tau_1}{\tau_2}}$$

— кривая, характеризующая частотные свойства излучения.

1-9. ПАРАМАГНИТНЫЙ УСИЛИТЕЛЬ

Трехуровневый метод возбуждения. В процессе возбуждения квантовой системы играют роль два противоречивых фактора. Для эффективной работы квантового усилителя необходимо иметь достаточное число избыточных частиц. Для этого надо использовать режим работы, как можно более далекий от насыщения. Это будет иметь место при слабых полях излучения, и в этом случае Δn может быть достаточно велико. Если бы это условие выполнялось в двухуровневой системе, то в ней весьма сильно проявлялись бы релаксационные процессы, и время жизни частиц в возбужденном состоянии может оказаться недостаточным для возникновения индуцированного излучения требуемой интенсивности. При сильном поле, наоборот, релаксационные процессы будут замедленными, но в этом случае мы подойдем к условию насыщения и режиму нелинейного усиления. Примирить эти два противоречивых условия, т. е. удли-

нить время жизни частиц и обеспечить работу в области, далекой от насыщения, оказывается возможным, если система будет обладать по крайней мере тремя энергетическими уровнями.

Трехуровневый метод возбуждения был предложен в 1955 г. Н. Г. Басовым и А. М. Прохоровым и использован впервые в квантовом усилителе на твердом теле.

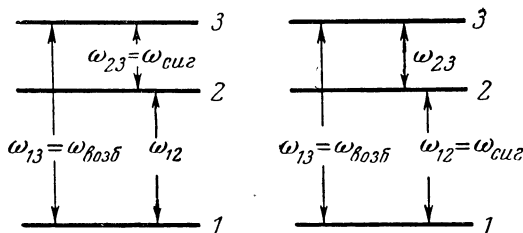


Рис. 1-17. Система с тремя энергетическими уровнями.

Этот метод известен также под названием возбуждения с помощью инверсии населенности уровней.

Сущность метода заключается в следующем.

Предположим, что имеется система с тремя энергетическими уровнями (рис. 1-17). В принципе здесь возможны переходы: $3 \rightarrow 2$; $3 \rightarrow 1$; $2 \rightarrow 1$ соответственно на частотах ω_{32} , ω_{31} и ω_{21} .

При тепловом равновесии числа частиц распределяются между уровнями, как известно, согласно следующему неравенству:

$$n_1 > n_2 > n_3. \quad (1-7)$$

Возбудим теперь систему мощным полем на частоте ω_{31} . Релаксационные процессы между этими уровнями будут полностью подавлены. Очевидно, что в данном случае неравенство (1-7) будет нарушено вследствие того, что при этом окажется, что $n_3 > n_2$. Таким образом, создадутся условия для вынужденного излучения на частоте ω_{32} . Однако может быть и другой случай, а именно при насыщении между уровнями 2 и 3 (что сопровождается так называемым безызлучательным переходом) наступит момент, когда $n_2 > n_1$, и при достаточно медленной релаксации между уровнями 2 и 1 может быть осуществлено вынужденное излучение на частоте ω_{21} .

Принцип действия парамагнитного усилителя (рис. 1-18). Если к задающим генераторам предъявляется в качестве основного требования высокая стабильность частоты, то для приемников основным требованием, кроме чувствительности, является необходимая полоса пропускаемых частот при большом коэффициенте усиления. Широкая полоса легче всего может быть получена при использовании твердых тел, у которых взаимодействие между элементарными частицами проявляется значительно сильнее, чем у жидких тел и, тем более, у газов. Большое практическое распространение получили парамагнитные вещества. К парамагнетикам относятся такие элемен-

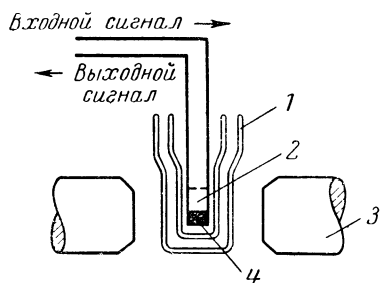


Рис. 1-18. Схема парамагнитного усилителя.

1 — криостат; 2 — резонатор; 3 — магнит; 4 — рабочее вещество.

ты, как хром, никель, железо, кобальт, марганец, гадолиний, самарий, эрбий и т. п. Суммарные магнитные моменты, возникающие в веществе, обуславливаются как собственными моментами отдельных электронов, так и орбитальными моментами атомов.

У веществ, атомы которых имеют заполненные электронные оболочки, суммарный орбитально-спиновой момент равен нулю. В таких телах парамагнитный резонанс невозможен. Элементы, в которых имеются одна или более незаполненных оболочек, обладают некоторыми результирующими моментами, которые могут взаимодействовать с внешним магнитным полем. Ориентация магнитного момента $\vec{\mu}$ по отношению к внешнему полю \vec{B} не может быть любой, а квантуется согласно известным правилам. Квантованная энергия кратна величине магнетона Бора, т. е.

$$\mu_B = \frac{eh}{2m_e}.$$

Принцип действия трехуровневых парамагнитных усилителей основан на следующем.

В простейшем случае используются энергетические уровни, созданные различной ориентацией электронных

спинов. В качестве примера активного вещества может быть рассмотрен упоминаемый нами выше кристалл искусственного рубина (Al_2O_3 , Cr_2O_3).

Если поместить такой рубин в постоянное магнитное поле, то произойдет расщепление каждого из уровней ионов хрома на ряд подуровней. Три из них используются для квантового усиления. Следующей задачей является перевод необходимого числа ионов из основного состояния в возбужденное. В трехуровневой системе необходимо получить избыток на самом верхнем уровне. Для этого используют вспомогательный высокочастотный генератор с частотой ω_{31} . Благодаря взаимодействию высокочастотного магнитного поля с магнитными моментами (спинами) ионы совершают переход с уровня 1 на уровень 3. При достаточно интенсивном поле происходит быстрое насыщение этих уровней. При этом релаксационные процессы, определяемые постоянной времени τ_{13} , оказываются подавленными, а уровень 3 по отношению к уровню 2 — перенаселенным. Таким образом, создается система уровней 2—3 с отрицательной температурой. Если на систему в таком состоянии подействовать слабым сигналом частоты ω_{32} , то произойдет на этой частоте индуцированное излучение, и следовательно, усиление сигнала.

В силу ранее приведенного соотношения (2-5) перестройка по частоте в парамагнитных усилителях осуществляется изменением величины постоянного магнитного поля. Зависимость энергетических уровней E_n от величины магнитной индукции B_0 приведена на рис. 1-19.

Шумовые свойства парамагнитных усилителей. Необходимость глубокого охлаждения активного вещества объясняется тем, что при нормальной температуре разность населенностей оказывается небольшой и при инверсии может быть получено недостаточное количество активных (возбужденных) частиц.

Сказанное подтверждается известным законом распределения Больцмана

$$\frac{N_n}{N_m} = e^{-\hbar\omega_{mn}/kT}, \text{ где } n > m.$$

Из этой формулы следует, что при обычных температурах (например, комнатной температуре, равной 290° K)

величина разности $N_m - N_n \approx 10^{-4}$ получается ничтожно малой по сравнению со значениями N_m и N_n .

Кроме того, при обычной температуре будут интенсивно проявляться тепловые процессы и постоянная спин-решеточной (тепловой) релаксации τ_1 становится малой, и для преодоления релаксационных процессов нужна весьма большая мощность источника накачки.

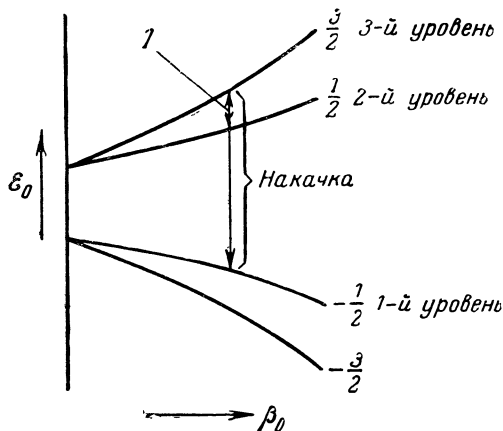


Рис. 1-19. Зависимость энергетических уровней парамагнитного вещества от величины магнитной индукции.

Все это говорит о необходимости глубокого охлаждения кристалла. Для этого применяют различные хладагенты (сухой лед, $\sim 195^\circ \text{K}$; жидкий азот, $\sim 77^\circ \text{K}$; жидкий водород, $\sim 20^\circ \text{K}$; жидкий гелий, $\sim 4,2^\circ \text{K}$).

Необходимость такого охлаждения является существенным недостатком квантовых усилителей на твердом теле по сравнению, например, с некоторыми типами параметрических усилителей. Однако таким способом добиваются весьма ощутительных результатов.

Так, например, при использовании в качестве охладителя жидкого гелия ($T \approx 4,2^\circ \text{K}$) коэффициент шума оказывается ничтожно малым и равным

$$F = 1 + \frac{T}{T_0} \approx 1,01, \text{ где } T_0 = 290^\circ \text{K},$$

т. е. шум-фактор составляет несколько сотых децибела. Шумовая температура, соответствующая такому шум-

фактору, мала вследствие того, что шумы, присущие обычным ламповым усилителям (шум-цепи постоянного тока, нагретых катодов, дробовой эффект и т. д.), в квантовых приборах полностью отсутствует. В них возможны лишь шумы теплового происхождения, возникающие в активном веществе и сводящиеся практически к нулю при очень сильном его охлаждении.

Что касается спонтанного излучения, также являющегося источником шума, то в диапазоне СВЧ оно играет ничтожно малую роль (вероятность спонтанного излучения при относительно низких частотах близка к нулю) и им можно пренебречь.

Представляет интерес определить минимальную шумовую температуру идеального квантового усилителя. Ненулевое значение этой температуры объясняется наличием ничем не устранимого шума вакуума.

Следующий элементарный расчет позволяет определить эту величину [Л. 25].

На выходе идеального усилителя мощность шума может быть выражена следующей формулой:

$$P_{\text{ш}} = G \left(\frac{h\omega}{e^{h\omega/kT} - 1} \right) B + (G - 1)h\omega,$$

где G — коэффициент усиления по мощности;

B — полоса частот, пропускаемых усилителем.

Первый член этого выражения является выходной мощностью теплового шума. Второй член — мощностью спонтанного шума, т. е. шума, создаваемого самим усилителем на своем выходе.

Предположим, что $G \gg 1$ и что $T \rightarrow 0$. В этом случае выходная мощность шума приближенно будет равна:

$$P_{\text{ш}} \approx Gh\omega B.$$

С другой стороны, по определению, шумовая температура $T_{\text{ш}}$ реального приемника равна усиленному тепловому шуму, соответствующему этой же температуре $T_{\text{ш}}$, т. е.

$$P_{\text{ш}} = G \left(\frac{h\omega}{e^{h\omega/kT} - 1} \right) B = Gh\omega B.$$

Отсюда

$$e^{h\omega/kT} = 2$$

и минимальная температура

$$T_{\text{ш}} = \frac{h\omega}{k \ln 2}.$$

Так, например, на частоте $\omega = 2\pi \cdot 10^9$ гц

$$T_{\text{ш}} \approx 0,3^\circ \text{ K},$$

что приблизительно в 10 раз меньше шумовой температуры реальных квантовых усилителей СВЧ, для которых $T_{\text{ш}} \approx 3,5 \div 4^\circ \text{ K}$.

1-10. ИНДУЦИРОВАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ В ОПТИЧЕСКОМ ДИАПАЗОНЕ

Особенности квантового усиления в оптическом диапазоне. Осуществление индуцированного излучения теоретически возможно в крайне широком диапазоне частот. По-видимому, нижняя его граница определится сверхтонкой структурой спектра излучения, в котором основную роль играют ядерные моменты атома. Верхняя граница в силу квантованности значений энергии, пропорциональных частоте, зависит от возможных запасов внутренней энергии атома (без нарушения его структуры). Установить точные границы с той и другой стороны не представляется возможным. Во всяком случае, оптический (т. е. видимый) диапазон волн, вплоть до фиолетовой области, оказался в указанном выше смысле вполне реализуемым. Однако надо иметь в виду, что по мере увеличения частоты будут возникать все большие затруднения из-за интенсивного возрастания спонтанного излучения (пропорционально кубу частоты). Возможно, что при этом полезное индуцированное излучение может быть полностью подавлено шумом спонтанного излучения. По всей вероятности, это обстоятельство в первую очередь и определит верхнюю границу частот, возможных для практического использования.

Другой причиной, затрудняющей применение весьма коротких оптических волн, является возникновение в веществе большого числа типов (мод) колебаний и необходимость получения в конечном счете излучения с минимальным их числом. Возникновение же огромного числа мод объясняется следующим. Если проводить

аналогию с резонаторами, используемыми в диапазоне СВЧ, то линейные размеры резонаторов в оптическом диапазоне должны составлять десятые доли микрона. Очевидно, конструкторско-технологическое выполнение таких резонаторов представит непреодолимые затруднения, а с энергетической точки зрения подобное решение теряет всякий практический смысл. Поэтому, естественно, возникла необходимость применить резонаторы обычных для диапазона СВЧ размеров с использованием колебаний весьма многих типов. При этом встала задача фильтрации массы излишних гармоник для получения колебаний, близких к монохроматическим и одномодовым.

Когерентность оптического излучения. В оптическом диапазоне волн вопросы монохроматичности и когерентности приобретают принципиально важное значение.

Возникающие здесь затруднения вытекают из того, что в процессе излучения участвует огромное число излучателей, распределенных в пространстве, не соизмеримом по своим размерам с длиной излучаемых волн.

Поясним сказанное.

Используемые на практике источники оптического когерентного (лазерного) излучения состоят, как известно, из множества элементарных излучателей — атомов вещества. Каждый такой излучатель (осциллятор) возбуждает свою сферическую волну. При индуцированном излучении связь между колебаниями отдельных осцилляторов, безусловно, существует, но степень этой связи в зависимости от условий может быть самой различной.

Кроме того, собственная когерентность (монохроматичность) каждого излучателя не является полной в связи с тем, что колебания их прежде всего ограничены во времени, о чем свидетельствует конечная ширина спектральной линии излучения.

Однако относительно высокая степень когерентности индуцированного излучения в оптическом диапазоне объясняется тем, что оно происходит по сравнению с периодом колебаний достаточно длительное время и с поверхности постоянной фазы, размеры которой значительно превышают величину λ^2 .

Напомним основную сущность необходимых нам понятий, начав с описания явления временной когерентности.

Временная когерентность. Монохроматическое колебание записывается в виде

$$a = A_0 \cos(\omega_0 t + \varphi_0),$$

где A_0 , ω_0 , φ_0 — постоянные величины, являющиеся соответственно амплитудой, круговой частотой и начальной фазой колебания.

Строго говоря, такие колебания являются идеализированными не только потому, что каждый реальный процесс ограничен во времени. Это обстоятельство в ряде практических случаев (в силу, например, огромного числа периодов колебаний на наблюдаемом отрезке времени) не играет особой роли. Более важным является то, что указанные выше параметры гармонического колебания вследствие ряда дестабилизирующих факторов не остаются во времени постоянными, а флуктуируют около некоторых средних значений. При этом флуктуации могут быть как быстрыми, так и могут носить характер медленных уходов от своих номинальных значений. Колебания такого типа называются квазигармоническими или, иначе, квазимонохроматическими. Их можно представить в виде суммы монохроматических колебаний с частотами, заполняющими относительно небольшой интервал частот $\Delta\omega$ около центральной частоты ω_0 . Такие излучения обычно наблюдаются в светящихся парах и газах, дающих узкие спектральные линии. Очевидно, что такие колебания в принципе не могут быть полностью когерентными.

Рассмотрим теперь два монохроматических колебания одной и той же частоты ω , но с беспорядочно изменяющимися во времени амплитудами и начальными фазами:

$$a_1 = A_1(t) \cos[\omega t - \varphi_1(t)];$$

$$a_2 = A_2(t) \cos[\omega t - \varphi_2(t)],$$

где амплитуды A_1 и A_2 и начальные фазы φ_1 и φ_2 являются статистически независимыми функциями времени.

Если разность фаз $\varphi_2 - \varphi_1$ остается постоянной, то такие колебания называются когерентными (во времени). Если же фазы φ_1 и φ_2 статистически независимы, причем их разность за достаточно большое время принимает равновероятно всевозможные значения от 0 до 2π ,

то такие колебания будут некогерентными. При наложении двух колебаний a_1 и a_2 их суммарная интенсивность будет равна:

$$A^2 = A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1).$$

Усреднение этой величины за достаточно большое время приводит к следующему выражению:

$$\overline{A^2} = \overline{A_1^2} + \overline{A_2^2} + \overline{2A_1A_2 \cos(\varphi_2 - \varphi_1)}.$$

Если $\varphi_2 - \varphi_1$ является определенной, то суммарное колебание оказывается не равным сумме интенсивностей слагаемых колебаний. В этом случае говорят, что имеет место явление интерференции. В случае, если $\cos(\varphi_2 - \varphi_1) = 0$, то

$$\overline{A^2} = \overline{A_1^2} + \overline{A_2^2}$$

и тогда интерференция отсутствует.

Итак, когда интерференционный член оказывается отличным от нуля, колебания можно назвать квазикогерентными. В этом случае следует как-то оценить степень когерентности. С этой целью вводят некоторый параметр, называемый когерентным расстоянием. Это то расстояние, на которое распространяется волна сохраняя, практически, полную когерентность. Эта величина определяется формулой

$$L = c\tau = \frac{c}{\Delta\omega},$$

где $\Delta\omega \approx 1/\tau$ — ширина спектральной линии;

τ — постоянная времени;

c — скорость света.

Расстояние L можно выразить также через так называемую радиационную ширину линии, являющейся постоянной величиной и равной $\Delta\lambda = 10^{-4} \text{Å}$.

Тогда

$$L = \frac{c}{\Delta\omega} = \frac{\lambda^2}{2\pi\Delta\lambda} = \frac{Q}{2\pi} \lambda,$$

где Q имеет смысл добротности колебательной системы, а величина $Q/2\pi$ является числом длин волн, укладываемых на расстоянии L .

Поскольку $\Delta\lambda = \text{const}$, т. е. от λ не зависит, когерентное расстояние оказывается пропорциональным λ^2 .

Однако благодаря малости $\Delta\lambda$ когерентное расстояние при индуцированном излучении оказывается по сравнению со спонтанным на много порядков больше.

Так, например, если при спонтанном излучении L имеет порядок 10^{-8} см, то при индуцированном излучении, например на волне в 10 мк, это расстояние увеличивается до 1 000 км!

Пространственная когерентность. Сущность пространственной когерентности может быть пояснена на примере твердотельного лазера, использующего в качестве активного вещества кристалл рубина в виде круглого цилиндрического стержня.

Свет, выходящий из торца такого стержня, если считать, что все моды колебаний, кроме аксиальных, подавлены, имеет строго определенное направление вдоль его оси. При этом угол расхождения, обусловленный дифракцией, возникающей на краях торцевой излучающей части стержня, будет минимальным и равным $\theta \approx \lambda/d$, где d — диаметр торцевой стенки стержня (апертуры). Благодаря тому, что все атомы излучают приблизительно в одной и той же фазе, совпадающей с фазой падающего на них излучения, плотность потока излучения на выходе лазера может достичь больших значений. В силу того, что процесс формирования волны в стержне является процессом резонансным, излучение будет почти монохроматическим и пространственно когерентным.

Пространственная когерентность излучения означает синфазность поля в плоскости торца и характеризует «плоскостность» луча. В силу этих причин, луч по выходе из генератора будет расходиться с расстоянием крайне медленно. В случае обычных источников света атомы излучают независимо друг от друга, т. е. хаотическим образом, и результирующая фаза излучения определится путем усреднения фаз излучения отдельными атомами. Эта средняя фаза будет флуктуировать от точки к точке пространства и от одного момента времени к другому. В литературе часто приводится весьма наглядное сравнение индуцированного и спонтанного излу-

чений. Оно состоит в том, что индуцированное излучение сравнивается с той картиной, которую можно наблюдать на воде при падении в нее камня. Спонтанное же излучение уподобляют волнам, получающимся при одновременном бросании в воду массы мелких камешков.

Заметим, что наиболее обобщенным критерием монохроматичности и когерентности колебаний реальных излучателей является функция корреляции — понятие, широко используемое в литературе по оптической квантовой электронике и которое, в сущности, характеризует те же физические явления, которые описаны выше.

Функция корреляции. Помимо того, что функция корреляции объединяет понятия как временной, так и пространственной когерентности, она является универсальной еще и в том отношении, что может быть с одинаковым успехом использована при рассмотрении электромагнитного поля как с волновой, так и корпускулярной точек зрения. Действительно, если считать поле потоком фотонов, то полная когерентность будет соответствовать тому случаю, когда количество фотонов, пересекающих единичную площадку в единицу времени, будет величиной постоянной.

В этом случае говорят, что флуктуация фотонного потока отсутствует. Во всех остальных случаях флуктуация будет иметь место и может быть определена путем усреднения по времени, в течение которого ведется наблюдение за потоком фотонов. Величина флуктуации будет прямым образом зависеть от степени корреляции между осцилляторами излучения. Таким образом, можно утверждать, что корреляция между колебаниями отдельных излучателей обуславливает когерентность электромагнитных волн, т. е. определенную связь между частотами и фазами отдельных колебаний.

При описании флуктуационных свойств поля с помощью функции корреляции обычно пользуются мгновенными значениями напряженности поля (электрической или магнитной, которую мы обозначим через V), представляя их в виде интеграла Фурье в комплексной форме:

$$V(x, y, z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} V(x, y, z, \omega) e^{i\omega t} d\omega,$$

где $V(x, y, z, \omega)$ — плотность амплитуд составляющих данного разложения.

Эти функции являются медленно меняющимися функциями времени по сравнению с изменением экспоненциального множителя. Так как величиной, доступной для наблюдения, является мощность потока, которая пропорциональна среднему значению квадрата амплитуды напряженности поля (обычно обозначаемой в данном случае через I), то следует перейти к величинам

$$I = \overline{V V^*},$$

равным (с точностью до постоянного множителя) мощности.

Для двух точек пространства $M(\mathbf{r}_1)$ и $M(\mathbf{r}_2)$ и соответственно для двух моментов времени t_1 и t_2 можно написать в соответствии с указанной выше формулой две функции автокорреляции:

$$\Gamma_{11} = \overline{V(\mathbf{r}_1, t_1) V^*(\mathbf{r}_1, t_1)};$$

$$\Gamma_{22} = \overline{V(\mathbf{r}_2, t_2) V^*(\mathbf{r}_2, t_2)}.$$

Формально, по аналогии со средним значением мощности, можно написать выражение для среднего значения общей мощности для точек \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 и моментов времени t_1 и t_2 соответственно:

$$I_{12} = \overline{V(\mathbf{r}_1, t_1) V^*(\mathbf{r}_1, t_1)} + \overline{V(\mathbf{r}_2, t_2) V^*(\mathbf{r}_2, t_2)} + \\ + \overline{2V(\mathbf{r}_1, t_1) V^*(\mathbf{r}_2, t_2)}.$$

Величина

$$\Gamma_{12} = \overline{V(\mathbf{r}_1, t_1) V^*(\mathbf{r}_2, t_2)}$$

носит название функции взаимной корреляции.

В первую очередь нас будут интересовать процессы, которые являются в статистическом отношении стационарными и удовлетворяют условию эргодичности.

Функция корреляции для таких процессов не зависит, как известно, от момента времени и определяется для двух точек пространства \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 лишь интервалом $t_2 - t_1 = \Delta t$:

$$\Gamma_{12} = \overline{V(\mathbf{r}, t) V^*(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}, t + \Delta t)}.$$

Отсюда легко получить выражения отдельно для временной и пространственной когерентности:

$$\Gamma_{12}(\mathbf{r}, \Delta t) = \overline{V(\mathbf{r}, t) V^*(\mathbf{r}, t + \Delta t)}$$

и

$$\Gamma_{12}(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}, t) = \overline{V(\mathbf{r}, t) V^*(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}, t)}.$$

Чаще пользуются нормированной функцией корреляции, т. е. отнесенной к функции корреляции при значении $\Delta t = 0$. Такая функция, называемая коэффициентом корреляции, равна:

$$\gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \Delta t) = \frac{\Gamma_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \Delta t)}{\sqrt{\Gamma_{11}(\mathbf{r}_1, 0) \Gamma_{22}(\mathbf{r}_2, 0)}}.$$

Коэффициент корреляции может принимать значения, лежащие в пределах

$$-1 \leq \gamma \leq +1.$$

Для полностью коррелированных сигналов $\gamma = \pm 1$, для полностью некоррелированных $\gamma = 0$.

Последний случай относится к двум колебаниям, сдвинутым по фазе на угол $\pi/2$, т. е. колебаниям, представляющим собой две взаимно ортогональные функции времени.

1-11. ОПТИЧЕСКИЙ КВАНТОВЫЙ ГЕНЕРАТОР (ЛАЗЕР)

Лазер на твердом теле. Впервые оптический квантовый генератор (ОКГ) был осуществлен в 1960 г. Мейманом (США). В качестве активного вещества в нем был использован рассмотренный нами в предыдущем параграфе кристалл искусственного рубина (Al_2O_3 , Cr_2O_3) с 0,05%-ным содержанием хрома. На рис. 1-20 изображена принципиальная схема ОКГ. Примерная картина используемых энергетических уровней кристалла рубина дана на рис. 1-21. Из этой схемы видно, что имеются две относительно широкие энергетические полосы и в синей и зеленой областях спектра. Затем следует промежуточный уровень 2 с относительно узкой полосой и, наконец, основной уровень 1, соответствующий невозбужденному состоянию вещества.

С шириной уровня связаны принципиально важные характеристики квантового генератора. Дело заключа-

ется в том, что чем шире линия уровня, тем меньше на ней время жизни возбужденной частицы. С другой стороны, суммарная энергия возбужденных «широкополосным» светом частиц тем больше, чем шире данный уровень. И, наоборот, чем он уже, тем время жизни частицы на нем больше, а суммарная энергия их меньше.

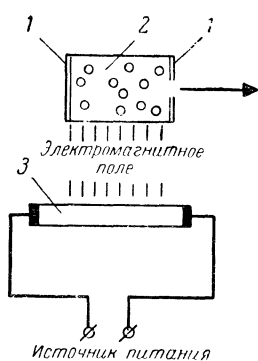


Рис. 1-20. Схема оптического квантового генератора на твердом теле.

1 — отражающие зеркала;
2 — активное вещество; 3 — источник возбуждающего поля.

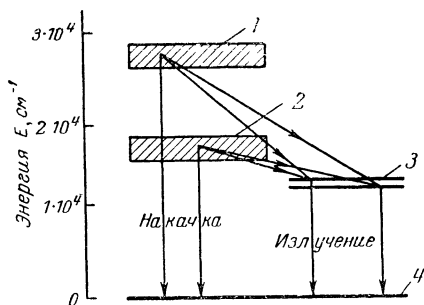


Рис. 1-21. Схема энергетических уровней кристалла рубина ($\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Cr}_2\text{O}_3$).

1 — полоса поглощения синего света; 2 — полоса поглощения зеленого света; 3 — метастабильный уровень; 4 — основной уровень.

Если этот уровень является верхним, с которого осуществляется излучательный переход, то с уменьшением его ширины монохроматичность излучения повышается. Практическая целесообразность использования изображенной на рис. 1-21 картины уровней станет еще яснее, если рассмотреть более детально принцип действия прибора.

В генераторах рассматриваемого типа в качестве источника импульсного возбуждения используются так называемые лампы-вспышки, в частности газосветная лампа, наполненная ксеноном. Способ возбуждения с помощью таких источников называется оптической накачкой или подсветкой. Спектр излучения такой лампы очень широкий. Относительно небольшая часть его поглощается веществом. Накачка происходит в основном на волне $\lambda = 5600 \text{ \AA}$, что соответствует зеленой части спектра на рис. 1-21. Как уже отмечалось выше, чем шире верхний уровень (в данном случае 3), тем к. п. д. генератора будет больше.

В начальном состоянии (до возбуждения вещества)

заселен преимущественно самый нижний уровень. Остальные уровни расположены от него так далеко, что энергия тепловых колебаний недостаточна для того, чтобы «забросить» частицы на высшие уровни. В результате накачки основная масса частиц будет «переброшена» с уровня 1 на уровень 3. Однако за весьма короткий промежуток времени (порядка 10^{-8} сек) почти все возбужденные частицы вследствие релаксации перейдут на уровень 2, совершая при этом так называемый безызлучательный переход. Уровень 2 является метастабильным, т. е. таким, на котором время жизни атома относительно большое (порядка 10^{-3} сек). При этих условиях уровни 2 и 1 окажутся на относительно длительное время с инвертированной населенностью, а система — способной к индуцированному излучению на частоте перехода:

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{h},$$

что соответствует в нашем случае волне $\lambda = 6943 \text{ \AA}$.

Однако в самом начале перехода $2 \rightarrow 1$, когда плотность поля излучения еще мала, наблюдается спонтанное излучение, длительность которого составляет порядка нескольких сотен микросекунд. После этого по достижении энергии поля достаточной плотности наступает индуцированное излучение, которое длится также несколько сотен микросекунд. В результате этого существовавшее ранее в веществе слабое поле этой же частоты ω_{21} будет усилено.

Для того чтобы получить режим генерации, необходимо создать соответствующие условия в виде положительных обратных связей. С этой целью распространяющуюся в прямом направлении волну после прихода ее к выходному концу стержня надо заставить обратить свое движение к началу стержня, т. е. к входу усилителя, от которого она должна отразиться и повторить указанный цикл вновь. Такие многократные отражения от торцовых концов стержня достигаются специальными зеркалами или нанесением тонких отражающих пленок на торцы самого вещества или с помощью вынесенных за стержень зеркал (рис. 1-22,б). Простейшим резонатором этого типа является широко используемый резонатор Фабри-Перро.

Поверхность одного торца (входного) является полностью отражающей, другого (выходного) — частично отражающей. В результате многократных отражений от торцов стержня интенсивность волны будет нарастать до тех пор, пока не будет достигнут стационарный режим работы генератора. Излучение (высвечивание) происходит через полупрозрачный слой.

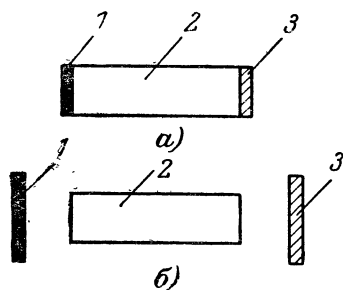


Рис. 1-22. Отражающие устройства в рубиновом резонаторе. 1 — непрозрачное стекло; 2 — рубиновый стержень; 3 — полупрозрачное зеркало.

Уменьшение числа возникающих в процессе усиления типов волн осуществляется в самом активном веществе. Рассмотрим этот процесс.

Рубиновый стержень с отражающими торцовыми поверхностями представляет собой объемный резонатор открытого типа. Отличительными свойствами такого резонатора, как указывалось выше, является то, что его

линейные размеры несоизмеримо велики по сравнению с длиной генерируемых волн. Именно это обстоятельство и создает благоприятные условия для возникновения в резонаторе огромного числа различных типов (мод) волн. Таким образом, возникает задача о выделении из всей массы типов волн минимального их числа, имея в виду, что оптимальным решением с энергетической точки зрения является получение волн одного типа (одной моды). Обычно диаметр стержня имеет размеры от 0,5 до 1,0 см, а его длина — от 2 до 10 см. В таких стержнях (как резонаторах) может быть возбуждено в оптическом диапазоне несколько миллионов типов колебаний в пределах частот, усиливаемых данным веществом. Наилучшим резонатором в этом отношении, т. е. выделяющим минимальное число типов колебаний, является, очевидно, резонатор, имеющий форму длинного стержня с малым поперечным сечением.

Оптимальную длину кристаллического стержня, при которой усилению практически подверглись бы лишь продольные (аксиальные) моды, можно определить, исходя из следующих рассуждений [Л. 5].

Предположим, что в стержне распространяется (на

рис. 1-23 слева направо) плоская волна. Набегая на полностью отражающее круглое зеркало диаметром D , часть волны отразится и будет распространяться в обратном направлении.

На некотором участке пути луч сохранит свою прямолинейность, а затем начнет расплываться. На доста-

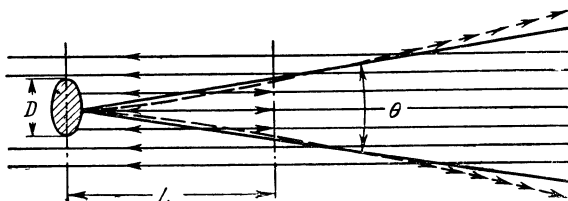


Рис. 1-23. К определению оптимальной длины кристаллического стержня.

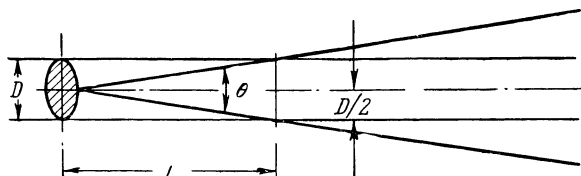


Рис. 1-24. К определению когерентного расстояния.

точном удалении от зеркала можно будет считать луч конусообразным с углом расхождения $\theta = \lambda/D$ радиан у вершины конуса, т. е. считать луч как бы порожденным точечным источником, помещенным в центре зеркала. Область определяемую расстоянием L от зеркала (рис. 1-23), называют ближней зоной. Этим расстоянием и определяется оптимальная длина стержня кристалла, в котором будут возникать практически лишь продольные моды. Значение этого расстояния определяется элементарным образом. Из рисунка 1-24 следует, что

$$\frac{D}{2} = L \operatorname{tg} \frac{\theta}{2}$$

или, имея в виду малость угла

$$D = L\theta,$$

но

$$\theta \approx \frac{\lambda}{D}.$$

Поэтому

$$D = \frac{L\lambda}{D}$$

и

$$L = \frac{D^2}{\lambda}.$$

Процесс возбуждения (накачки) происходит следующим образом (рис. 1-25). Излучение от источника накачки падает на боковые стенки активного вещества. Возбужденные в нем световые волны при своем движении в стержне будут вовлекать в процессе все новые и новые атомы. Большая часть волн, распространяющихся не строго параллельно оси системы, отразившись несколько раз от торцовых стенок стержня, в конечном счете выйдет через боковые стенки за его пределы. На рис. 1-25 темными и светлыми точками обозначены соответственно невозбужденные и возбужденные атомы кристалла, сплошная линия означает свет подкачки и пунктирная — излучение.

В результате в стержне останется небольшое число волн, представляющих собой так называемые аксиальные моды колебаний, т. е. те типы волн, которые движутся практически лишь параллельно оси стержня. Эти оставшиеся моды после многократных отражений от концов стержня и возбуждения все большего числа атомов будут нарастать до тех пор, пока не будет исчерпан весь запас активных частиц или не наступит стационарный режим, обусловленный нелинейностью системы.

Как уже указывалось выше, одно из зеркал резонатора, а именно выходное, является полупрозрачным и поэтому часть накопившейся в резонаторе энергии выйдет из резонатора в виде узкого, почти параллельного луча.

Таким образом, в результате описанного процесса система как бы автоматически выбирает из огромного числа возможных типов колебаний те немногие, которые распространяются лишь вдоль оси системы.

Кроме того, отфильтрованные по типам волны должны попасть в тот узкий интервал частот, внутри которого коэффициент усиления имеет достаточно большую величину, что и определит ширину спектра излучения.

Несмотря на это, когерентное излучение, возникающее в активном веществе (резонаторе), обладает относительно широким спектром и составляет примерно $0,1\text{\AA}$, т. е. порядка 10^{-9} *ом*. Одной из причин уширения спектральной линии является то, что излучение носит многомодовый характер и, кроме того, практически

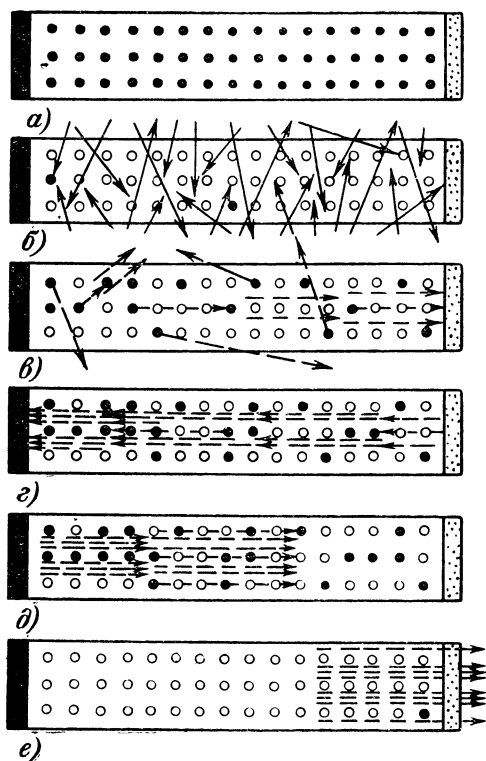


Рис. 1-25. Формирование светового луча в рубиновом резонаторе.

каждый отдельный импульс излучения, представляя собой интегральный эффект действия огромного числа элементарных излучателей, состоит из ряда коротких импульсов — «пичков» с длительностью примерно 10^{-6} *сек* каждый.

Для того чтобы устранить указанные недостатки и получить однородные весьма короткие и мощные им-

пульсы (что представляет большой практический интерес), используют специальные методы формирования лазерного луча. Общим принципом этих методов является сведение к минимуму числа мод при предельном укорочении импульса излучения. Такие весьма короткие и сверхмощные импульсы получили название гигантских. Их мощность достигает 10^8 вт/см² и более, а длительность — 10^{-7} сек и менее.

Наиболее распространенные на практике методы получения сверхкоротких гигантских импульсов — это методы управления добротностью резонатора (называемые также модуляцией добротности).

Идея этих методов заключается в том, что инверсия населенностей с большой избыточностью на метастабильном уровне создается при относительно низкой добротности резонатора, возникновение же генерации и сам акт излучения, наоборот, осуществляются в те моменты времени, когда добротность достигает весьма больших значений.

Такая переменная добротность может быть создана различными путями как с помощью механических, так и электро- или магнитооптических систем. Относительно простым решением этой задачи является механическое вращение одного из отражателей резонатора со скоростью примерно 20 000—30 000 об/мин.

Такое вращение происходит в плоскости оси резонатора. Максимумы добротности, при которых возникает генерация и формируется гигантский импульс излучения, соответствуют тем весьма кратким моментам времени, в течение которых отраженный от вращающегося зеркала луч направлен строго вдоль оси резонатора.

Газовый лазер (метод возбуждения электрическим разрядом). В газовом лазере (предложен Джаваном, Беннетом и Харритом), схема которого приведена на рис. 1-26, источником возбуждения атомов служит электрический разряд. Этот разряд создается с помощью высокочастотного генератора в газовой смеси, например смеси гелия и неона, находящихся при низком давлении (Не при 1 мм рт. ст. и Ne при 0,1 мм рт. ст.). В качестве примера можно привести следующие данные: длина стеклянной трубки $l \approx 100$ см, ее диаметр $d \approx 1,5$ см. Плоские зеркала вделаны в торцы трубки. Точность установки зеркал на взаимную параллельность должна

составлять несколько угловых секунд. Разряд осуществляется с помощью внешних электродов.

В более поздних конструкциях газовых лазеров с целью максимального приближения к условиям одномодового излучения торцы стеклянной трубки выполня-

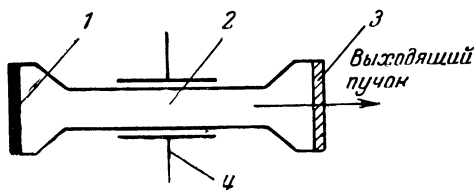


Рис. 1-26. Схема газового лазера.

1 — отражающее зеркало; 2 — смесь гелия и неона; 3 — полупрозрачное зеркало; 4 — электроды для подачи возбуждения.

лись в виде окон 2, наклоненных к оси трубки под углом Брюстера. Такая конструкция обеспечивала селективное усиление мод, поляризованных лишь в плоскости падения луча на зеркало. Как известно, при угле

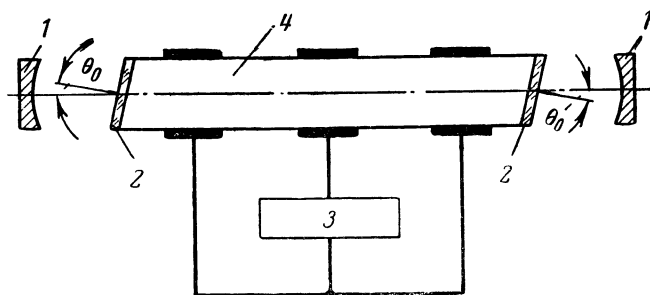


Рис. 1-27. Схема газового лазера с вогнутыми зеркалами и окнами, наклоненными под углом Брюстера.

Брюстера поляризованные в плоскости падения лучи полностью (т. е. без отражения) проходят через границу раздела двух сред, в данном случае через скошенные окна трубки (рис. 1-27).

Кроме того, для лучшей фокусировки луча вместо плоских используются вогнутые зеркала 1. Следует отметить, что большая направленность излучения в принципе может быть достигнута как с вогнутыми, так и

с плоскими зеркалами. Однако в последнем случае точность в параллельности зеркал должна быть необычайно высокой — рассогласование порядка нескольких угловых секунд является уже недопустимым.

На рис. 1-28 изображена схема энергетических уровней атомов гелия (He) и неона (Ne).

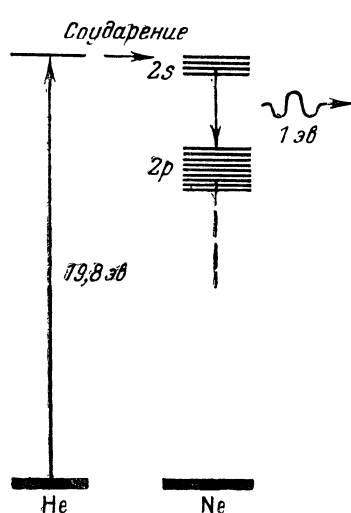


Рис. 1-28. Схема энергетических уровней смеси газов He и Ne.

Применение в данном случае способа возбуждения активного вещества с помощью электрического разряда, а не с использованием накачки объясняется тем, что линии поглощения спектра атомов этих газов весьма узкие, поэтому возбуждение вещества при накачке будет малым и к. п. д. генератора — недопустимо низким.

Из рис. 1-28 видно, что уровни $2s$ и $2p$ являются сложными, образующими структуры, состоящие из ряда близко лежащих друг к другу линий. Атомы гелия под воздействием разряда переходят с основного уровня на более высокий, и, будучи возбужденными при встрече

с атомами неона, отдают им свою энергию, возвращаясь при этом в основное состояние. При таком столкновении атомы неона переходят из основного состояния в возбужденное, т. е. на уровень $2s$. В результате этих переходов возникает значительная инверсия населенностей уровней $2s$ и $2p$, что является необходимым условием для индуцированного излучения на частотах указанных переходов. Между уровнями $2s$ и $2p$ возможно до 30 различных переходов, соответствующих волнам инфракрасного диапазона ($\lambda = 1,118 \text{ мк}$; $1,153 \text{ мк}$; $1,160 \text{ мк}$; $1,199 \text{ мк}$; $1,5 \text{ мк}$ и т. д.). Наиболее интенсивное излучение наблюдается на волне $1,153 \text{ мк}$. Мощность таких лазеров крайне мала (порядка 1 мвт). Они являются генераторами непрерывного излучения с весьма большой монохроматичностью и высокой направленностью.

Ширина линии излучения составляет всего лишь $3 \times 10^{-7} \text{ \AA}$, что соответствует полосе частот $\Delta f \approx 10^4 \text{ гц}$.

К настоящему времени разработаны более мощные газовые лазеры, использующие в качестве активных веществ различные смеси и работающие в диапазоне длин волн от нескольких долей миллиметра до волн ультрафиолетовой области спектра. Так, например, по сообщению французского журнала *L'onde électrique*, Fevr. 1966, p. 266 исследовательским центром фирмы General Electric создан газовый лазер на смеси $\text{CO}_2\text{—N}_2\text{—He}$ мощностью около 300 вт и к. п. д. порядка 10%.

Полупроводниковый лазер (возбуждение методом инжекции). Экспериментально установленное явление излучения из области $p\text{—}n$ перехода полупроводника галлий — мышьяк (Ga—As) когерентного света в результате прохождения через этот переход электрического тока привлекло внимание многих ученых. Большая заслуга в этом отношении принадлежит советским физикам (Басову, Крохину, Попову и др.), которые впервые обратили внимание на указанное выше свойство полупроводников и провели ряд важных как теоретических, так и экспериментальных исследований. Первый образец полупроводникового лазера был создан в 1962 г.

Несомненным достоинством таких источников когерентного света явилась простота метода их возбуждения путем непосредственного преобразования энергии электрического тока в энергию излучения и, что особенно ценно, с исключительно высоким к. п. д., который в принципе может быть близким к 100%.

Из рассмотрения квантовых усилителей и генераторов различного типа можно установить следующие их свойства. Использование в качестве активного вещества достаточно разреженного газа позволяет получить приборы с ярко выраженными резонансными свойствами (молекулярный генератор СВЧ, газовый лазер). Применение же твердых тел, в частности кристаллических, приводит к противоположному эффекту — к созданию приборов с достаточно широкой полосой частот (парамагнитный усилитель СВЧ, рубиновый лазер).

Очевидно, что к категории последних следует отнести и полупроводниковый лазер. Полупроводниковый кристалл представляет собой упорядоченную атомную систему, т. е. систему, обладающую регулярной пространственной структурой.

Такую структуру с радиотехнической точки зрения можно уподобить системе огромного числа сильно связанных контуров, обладающих одной и той же частотой собственных колебаний. В переводе на язык квантовой механики это означает, что каждый атом обладает одной и той же энергией, и если взаимная связь между атомами была бы слабой (как это имеет место в разреженных

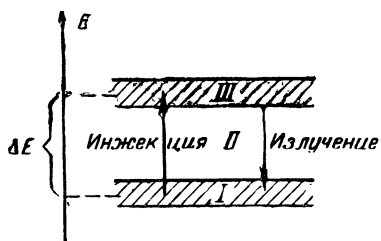


Рис. 1-29. Схема энергетических уровней чистого полупроводника.

газах), то вся система оказалась бы энергетически вырожденной.

При сильной же связи, которая существует в кристалле между атомами, эти уровни расщепляются, причем разность между ними оказывается ничтожно малой, а число расщепленных подуровней — огромным.

Все это ведет к образованию сплошных энергетических полос, называемых обычно *зонами*.

Энергетический спектр идеального полупроводника состоит из трех четко выраженных участков, называемых в порядке возрастания уровня энергии валентной зоной *I*, запрещенной зоной *II* и зоной проводимости *III*. Энергетические состояния электронов в *I* и *III* зонах образуют, как это было только что сказано, практически непрерывные спектры собственных значений энергии (рис. 1-29).

В валентной зоне электроны сильно связаны со своими атомами; в зоне же проводимости, наоборот, эта связь слабая и электроны свободно перемещаются в ней от атома к атому.

Возбуждение электронов полупроводника состоит во введении (инъекции) носителей зарядов в область *p-n* перехода полупроводникового диода, т. е. путем пропускания в прямом направлении большого тока. При этом электронам, находящимся в валентной зоне, сообщается дополнительная энергия. Таким образом, каждый возбужденный электрон переходит на более высокий уровень, расположенный в зоне проводимости. В результате такого процесса в зоне проводимости появляются свободные электроны, а в валентной зоне образуются дырки. Свободные электроны при своем движении в зоне

проводимости передают часть своей энергии кристаллической решетке, энергия их убывает и электроны «подходят» к нижнему краю зоны проводимости. Описанный процесс характеризуется временем релаксации τ_1 . Обратный переход электронов, называемый рекомбинацией пар электрон — дырка, характеризующийся временем τ_2 , сопровождается излучением энергии в виде световых квантов. Для создания инвертированного состояния необходимо, чтобы $\tau_2 \gg \tau_1$. При малых токах этот процесс носит хаотический характер и излучение получается некогерентным, занимающим весьма широкий спектр частот. Увеличение тока возбуждения ведет к появлению большого числа пар электрон — дырка. Когда плотность тока возбуждения достигнет значительной величины, может наступить такое состояние, когда число излучаемых фотонов превысит число фотонов, поглощаемых полупроводником.

При этих условиях излучение становится когерентным, а следовательно, узкополосным по частоте и узконаправленным в пространстве. Так как толщина p - n перехода равна нескольким микронам, лазерное излучение имеет форму очень узкого веерообразного луча. Угол расхождения этого луча составляет около 1° . Средняя же частота излучения равна $\omega \approx \Delta E / \hbar$, где ΔE — ширина запрещенной зоны.

Следует отметить, что, охлаждая кристалл до температуры жидкого гелия или хотя бы жидкого азота, можно существенно снизить величину тока инжекции. Для предотвращения перегрева кристалла ток пропускают через p - n переход в виде весьма коротких импульсов длительностью несколько микросекунд.

Из сказанного выше следует, что вынужденное излучение возможно только между узкими областями нижней части зоны проводимости и верхней части валентной зоны. Ширина этого интервала зависит от величины тока инжекции, а также температуры и давления. Такая зависимость является одновременно и вредной, и полезной. Действительно, с одной стороны, она ухудшает стабильность частоты генерируемых колебаний, с другой — позволяет осуществлять перестройку генератора по частоте, что имеет определенное практическое значение.

В настоящее время разработано много различных типов полупроводниковых лазеров. Схематическое

устройство одного из первых его образцов изображено на рис. 1-30. В этом лазере в качестве активного вещества используется упомянутый выше монокристалл арсенида галлия с примесью цинка. Устройство имеет форму усеченной пирамиды. Две боковые грани тщательно полируются и располагаются строго параллельно друг другу, образуя пару полупрозрачных зеркал (с коэффициентом отражения порядка 30%) объемного резонатора. Две другие грани скошены, чтобы исключить возникновение излучения, перпендикулярного основному направлению. Основание пирамиды выполнено из вещества типа n , верхняя часть — из вещества типа p . Между ними образуется переходный слой. Питающий ток подается импульсами длительности 2—5 мксек. Плотность тока составляет 8 000 а/см². Длина генерируемых волн равна 8 400 Å. Вообще же лазеры подобного типа способны давать излучение на волнах от 6 200 до 8 400 Å. Ширина спектральной линии составляет около 15 Å. Охлаждение активного вещества производится с помощью жидкого азота ($\sim 77^\circ \text{K}$).

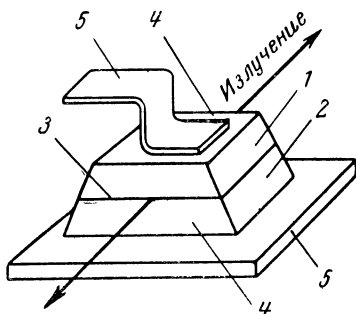


Рис. 1-30. Схема полупроводникового лазера.

1 — Ga—As p -типа; 2 — Ga—As n типа; 3 — p - n переход; 4 — полированные грани; 5 — контакты.

Охлаждение активного вещества производится с помощью жидкого азота ($\sim 77^\circ \text{K}$). Отличительной чертой полупроводниковых лазеров, как уже отмечалось выше, является их крайне высокий к. п. д., который может достигать теоретически 100%. Заканчивая обзор общих свойств лазеров, полезно подчеркнуть их наиболее характерные черты в зависимости от типа используемых в них активных сред. Характерной особенностью твердотельных лазеров является возможность реализовать с помощью их импульсы весьма большой мощности; для газовых лазеров весьма типична высокая монохроматичность колебаний в режиме непрерывного излучения; полупроводниковые лазеры отличаются весьма высоким к. п. д.

Охлаждение активного вещества производится с помощью жидкого азота ($\sim 77^\circ \text{K}$). Отличительной чертой полупроводниковых лазеров, как уже отмечалось выше, является их крайне высокий к. п. д., который может достигать теоретически 100%. Заканчивая обзор общих свойств лазеров, полезно подчеркнуть их наиболее характерные черты в зависимости от типа используемых в них активных сред. Характерной особенностью твердотельных лазеров является возможность реализовать с помощью их импульсы весьма большой мощности; для газовых лазеров весьма типична высокая монохроматичность колебаний в режиме непрерывного излучения; полупроводниковые лазеры отличаются весьма высоким к. п. д.

Охлаждение активного вещества производится с помощью жидкого азота ($\sim 77^\circ \text{K}$). Отличительной чертой полупроводниковых лазеров, как уже отмечалось выше, является их крайне высокий к. п. д., который может достигать теоретически 100%. Заканчивая обзор общих свойств лазеров, полезно подчеркнуть их наиболее характерные черты в зависимости от типа используемых в них активных сред. Характерной особенностью твердотельных лазеров является возможность реализовать с помощью их импульсы весьма большой мощности; для газовых лазеров весьма типична высокая монохроматичность колебаний в режиме непрерывного излучения; полупроводниковые лазеры отличаются весьма высоким к. п. д.

Охлаждение активного вещества производится с помощью жидкого азота ($\sim 77^\circ \text{K}$). Отличительной чертой полупроводниковых лазеров, как уже отмечалось выше, является их крайне высокий к. п. д., который может достигать теоретически 100%. Заканчивая обзор общих свойств лазеров, полезно подчеркнуть их наиболее характерные черты в зависимости от типа используемых в них активных сред. Характерной особенностью твердотельных лазеров является возможность реализовать с помощью их импульсы весьма большой мощности; для газовых лазеров весьма типична высокая монохроматичность колебаний в режиме непрерывного излучения; полупроводниковые лазеры отличаются весьма высоким к. п. д.

Охлаждение активного вещества производится с помощью жидкого азота ($\sim 77^\circ \text{K}$). Отличительной чертой полупроводниковых лазеров, как уже отмечалось выше, является их крайне высокий к. п. д., который может достигать теоретически 100%. Заканчивая обзор общих свойств лазеров, полезно подчеркнуть их наиболее характерные черты в зависимости от типа используемых в них активных сред. Характерной особенностью твердотельных лазеров является возможность реализовать с помощью их импульсы весьма большой мощности; для газовых лазеров весьма типична высокая монохроматичность колебаний в режиме непрерывного излучения; полупроводниковые лазеры отличаются весьма высоким к. п. д.

1-12. О ЕДИНСТВЕ ПРИНЦИПА ЭЛЕКТРОННОГО УСИЛЕНИЯ

Самое общее ознакомление с принципами работы квантовых усилителей позволяет сделать вывод о том, что между ними и электронными усилителями обычного типа, несмотря на существенное различие, отмеченное во введении, имеется и нечто общее. Таким общим для них является сам принцип электронного усиления. Чтобы это утверждение стало очевидным, обратимся к сравнительному описанию механизма действия тех и других приборов.

В случае обычных электронных ламп мы имеем дело со свободными электронами вещества, эмиттированными в вакуумное пространство, где они получают энергию от специального источника питания (возбуждения). Затем под влиянием внешнего, обычно слабого, поля сигнала возбужденные электроны отдают свою энергию нагрузке — полю колебательной системы.

В квантовых приборах свободных электронов нет, в них участвуют связанные электроны, входящие в состав атомов вещества. Описание процессов в таких системах существенно отличается от тех, которые были применимы к свободным электронам. Механизм взаимодействия связанных зарядов с внешними полями также иной. Первичной колебательной системой, в которой реализуются усиленные колебания, в данном случае является само вещество — источник активных частиц. В некоторых случаях, как, например, в твердотельных лазерах, активное вещество, снабженное отражающими устройствами, является одновременно и единственной колебательной системой прибора в целом, где накапливается высокочастотная энергия, излучаемая затем в свободное пространство.

Перечисленные здесь отличия квантовых приборов от обычных электронных ламп и явились причиной существенно новых их качеств, а именно изменения на много порядков ряда характеристических величин и, в частности, возможности получения когерентных и близких к монохроматическим колебаний в оптическом диапазоне волн, что было в принципе недостижимо с обычными электронными приборами.

Однако, если говорить лишь об основных принципах электронного усиления и генерирования, о главных чертах этих процессов, то они в основе своей оказываются для электронных приборов любого типа едиными. Нетрудно установить, что основой работы любого электронного усилителя является индуцированное излучение, хотя этот термин по вполне понятным причинам никогда не фигурировал в описании электронных приборов обычного типа.

Чтобы подтвердить правильность этого утверждения, достаточно рассмотреть элементарную схему линейного усилителя, не оговаривая, какого именно типа прибор классический или квантовый осуществляет усиление. В связи с этим представим усилитель в виде четырехполюсника («черного ящика»), имеющего два входных и два выходных зажима (рис. 1-31), полагая, что источник питания (возбуждения) находится внутри этого ящика. Совершенно ясно, что сигнал, действуя на входе усилителя, не может быть сам по себе усиленным. Усиление осуществляется, как известно, за счет энергии местного источника (источника возбуждения или, иначе, питания). А это означает, что сигнал может лишь воздействовать на электронную схему, причем так, чтобы она вызвала «излучение» электронов, возбужденных местными источниками, на

той же частоте и в той же фазе, что и действующий на входе усилителя сигнал.

Очевидно, что именно этот принцип положен в основу любого электронного прибора. Действительно, последний, работающий либо в режиме усиления, либо в режиме генерации, представляет собой устройство, преобразующее энергию источника питания, (или, иначе, возбуждения) в энергию электромагнитного поля, обладающего тем или иным спектром. Это преобразование осуществляется

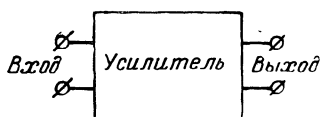


Рис. 1-31. Схема четырех-полюсника.

с помощью носителей зарядов, находящихся либо в свободном, либо в связанном состоянии, что для конечного эффекта усиления совершенно безразлично.

В обычных электронных приборах обмен энергиями между электронами и электрическим полем выражается в том, что электроны испытывают попеременно то ускорение, то торможение. Этот процесс яв-

ляется ничем иным как модуляцией электронного потока по плотности в соответствии с законом усиливаемого лампой сигнала. В пролетных приборах, как известно, предварительно, перед модуляцией электронов по плотности, осуществляется модуляция их по скорости. «Усиление» мощности и выделение ее в колебательном контуре у обычных ламп происходит за счет того, что, в то время как имеет место ускорение электронов, число последних, участвующих в процессе, минимально; оно оказывается максимальным при тормозящей фазе анодного напряжения. Это происходит потому, что мгновенные фазы анодного и сеточного напряжений противоположны друг другу. В то же время напряжение на сетке и усиленное напряжение на колебательном контуре по фазе совпадают. Все эти хорошо известные соотношения особенно просто могут быть продемонстрированы на примере линейного усилителя с активной нагрузкой.

Однако описанный выше процесс можно интерпретировать и таким образом: от источника питания электронам сообщается энергия, т. е. электроны как бы переводятся на высшие энергетические уровни. Затем на сетку лампы подается сигнал, который взаимодействует с этими возбужденными электронами, причем это взаимодействие происходит таким образом, что они отдают свою энергию («излучают») не только на частоте сигнала, но и в фазе с ним.

Эта интерпретация полностью совпадает с той, которой пользуются при описании процесса усиления с помощью квантового прибора.

Единство общего принципа подчеркивается еще и тем обстоятельством, что в обоих случаях усилительные устройства включают в себя как обязательные следующие элементы:

1) источник активных частиц (накаливаемая нить, активное вещество);

2) источник возбуждения (питания) в виде постоянного электрического поля или поля высокой частоты;

3) входное устройство усилителя, куда подается сигнал, взаимодействующий с возбужденными частицами;

4) выходное устройство усилителя, с которого поступает в нагрузку усиленный сигнал.

ГЛАВА ВТОРАЯ

ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ И МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Для более углубленного познания принципов действия квантовых приборов, а также для того, чтобы иметь возможность пользоваться более серьезной литературой по квантовой электронике, совершенно необходимо достаточно глубокое понимание идей и принципов квантовой механики и особенно раздела, посвященного вопросам взаимодействия поля излучения с веществом.

2-1. КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВАЯ ПРИРОДА МИКРОЧАСТИЦ

Электромагнитное поле и фотоны. Двойственная природа материи была впервые обнаружена Эйнштейном при рассмотрении вопроса о природе света. Было установлено, что свет является не только волновым процессом, но одновременно и потоком частиц — фотонов, обладающих определенными значениями энергии и импульса. Как известно, между величинами, характеризующими волновые свойства фотонов, и величинами, характеризующими их корпускулярные свойства, существуют соотношения:

$$\varepsilon = \hbar\omega;$$

$$p = \hbar k;$$

здесь ω и ε — частота и энергия фотона, k и p — его волновой вектор и импульс.

В этих выражениях ясно выступает связь между волновыми и корпускулярными свойствами света.

Указанные соотношения позволяют описать процессы распространения электромагнитных волн языком смешанной теории — корпускулярно-волновой. Однако

оба эти свойства — корпускулярное и волновое — проявляются в различной степени в зависимости от характера излучения и условий его наблюдения. Так, например, при весьма малой плотности энергии свет проявляет преимущественно свои корпускулярные свойства; при большой плотности, наоборот, он становится типичным волновым процессом.

Исходя из данных известных опытов, мы можем представить следующую картину. Мысленно выделим какую-либо область экрана, на которую падает редкий поток высокоэнергетических фотонов, и будем следить за этим процессом в течение достаточно длительного времени. Мы увидим, как постепенно на экране будет все резче и резче выявляться волновой характер процесса.

Богатый экспериментальный материал наблюдения за процессами подобного рода дает основания утверждать, что свету присущи оба свойства, однако в зависимости от условий, а также от приборов наблюдения свет можно охарактеризовать в большей мере либо как корпускулярное, либо как волновое явление. Так, дискретный характер поля будет сказываться лишь в тех случаях, когда интенсивность поля (при неизменной частоте излучения) будет очень мала.

Когда мы говорим, что «дискретный характер поля будет сказываться», то прежде всего под этим мы подразумеваем не само поле, которое по своему классическому определению является непрерывным, а реакцию, которая вызывает это поле у прибора корпускулярного типа (например, счетчика фотонов).

Самым существенным во взаимодействии поля с веществом является тот факт, что при поглощении энергии фотона например, электроном, она остается неизменной (при данной частоте), какова бы ни была интенсивность излучения. Последняя связана только с количеством фотонов, а не с их индивидуальными свойствами.

Является весьма показательным опыт по прохождению потока фотонов через две узкие щели диафрагмы (рис. 2-1). Поток делится диафрагмой на два пучка. На экране, стоящем за диафрагмой, получаем периодическое (зависящее от длины волны света) распределение светлых и темных полос в соответствии с классическими законами интерференции. Если мы попытаемся объяснить эту картину с чисто корпускулярной точки зрения как наложение двух потоков, проходящих через отдель-

ные щели (попеременно закрывая то одну, то другую щель), то приходим к неверному результату. Опыт показывает, что при малом числе фотонов мы получим на экране хаотическую картину точек, которая лишь по прошествии достаточно большого времени, т. е. после прохождения через щели большого числа фотонов, превратится в непрерывный узор интерференционных полос.

Из сказанного можно сделать вывод: движение фотонов не подчиняется законам классической механики, однако при большом числе фотонов их поведение становится таким, что оно может быть достаточно удовлетворительно описано с помощью классической теории поля.

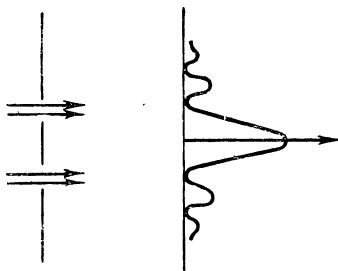


Рис. 2-1. Прохождение потока фотонов через две узкие щели.

Нам известны из классической электродинамики такие условия (когда $\lambda \rightarrow 0$), при которых распространение света можно условно рассматривать как движение частиц. В данном случае их «траекториями» являются лучи, понимаемые в смысле геометрической оптики. Эти лучи представляют собой совокупность кривых, ортогональных к семейству некоторых поверхностей, называемых волновыми поверхностями. Однако при прохождении фотонов через узкие отверстия или при огибании препятствия, когда условие $\lambda \rightarrow 0$ не может быть удовлетворено, концепция траекторий (лучей) должна быть отставлена и тогда описание можно вести лишь на языке волновой теории.

Гипотеза де Бройля. Огромной заслугой де Бройля явилось то, что точно такую же трактовку движения он предложил в отношении элементарных частиц, обладающих нулевой массой покоя и движущихся с любой скоростью, меньшей скорости света (1924 г.). Им была проведена следующая параллель: как для классической волновой теории света геометрическая (по сути дела корпускулярная) оптика является ее предельным выражением при стремлении длины волны к нулю, точно так же классическая механика должна явиться предельным выражением (обычно при этом пишут, что

$h \rightarrow 0$) более общей механики, которую следует назвать волновой (используется также термин «квантовая механика»).

Согласно де Бройлю, движение микрочастиц сопоставляется с некоторыми волнами. Их называют дебройлевскими волнами или, иначе, волнами материи. Длина таких волн может быть выражена через планковскую постоянную и импульс частицы аналогично известному уже выражению для фотона:

$$\lambda = \frac{2\pi h}{p} = \frac{2\pi h}{mv}.$$

Эта формула справедлива для скоростей, много меньших скорости света ($v \ll c$), причем под v следует понимать механическую скорость частицы, обладающей массой m . Таким образом, если частицы движутся около препятствия или проходят сквозь щели диафрагмы, размеры которых сравнимы с длиной дебройлевской волны, они будут вести себя так же, как ведут себя в аналогичных условиях волны.

Известные опыты Дэвиссона и Джермера с пучком электронов, рассеиваемых на решетке кристалла, блестяще подтвердили правильность предположений де Бройля. Ими была получена на экране дифракционная картина для электронов в полном соответствии с волновыми законами этого явления. Позже аналогичные опыты были проведены с молекулами водорода и гелия, атомарным водородом, нейтронами и т. д. Все эти эксперименты подтвердили наличие у микрочастиц волновых свойств и справедливость указанной выше гипотезы.

2.2. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

Соотношения неопределенностей. Двойственная природа микрочастиц математически выражается в так называемых соотношениях неопределенностей, сформулированных в 1927 г. В. Гейзенбергом.

Соотношения неопределенностей логически вытекают из хорошо известной в теории колебаний связи, существующей между длительностью сигнала Δt и полосой частот $\Delta \omega$:

$$\Delta \omega \Delta t \approx 1.$$

Поскольку для микрочастиц справедлива формула

$$\Delta\omega = \frac{\Delta E}{h}$$

то, очевидно, можно написать, что

$$\Delta E \Delta t \approx h. \quad (2-1)$$

Выражение (2-1) является одним из соотношений неопределенностей Гейзенберга.

Аналогичным образом могут быть установлены соотношения между неопределенностями проекций импульса и соответствующими им координатами:

$$\Delta p_x \Delta x \approx h; \quad \Delta p_y \Delta y \approx h; \quad \Delta p_z \Delta z \approx h.$$

Эти соотношения также вытекают из известной классической формулы, связывающей ширину волнового пакета Δx с разбросом волновых чисел Δk_x :

$$\Delta k_x \Delta x \approx 1.$$

Таким образом, если признать справедливыми приведенные выше классические закономерности, а также два фундаментальных постулата квантовой теории ($E = h\omega$ и $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$), то соотношения неопределенностей получаются из них как прямое следствие.

Сущность соотношений неопределенностей для координаты и импульса может быть пояснена с помощью следующего известного опыта. Предположим, что поток электронов проходит сквозь узкую щель диафрагмы (рис. 2-2). Ширину щели обозначим через a . Точного места прохождения электрона через щель указать невозможно. Поэтому неопределенность его положения вдоль оси x , совмещенной с направлением щели, можно считать равной $\Delta x = a$. Вследствие дифракции, движение электрона, а следовательно, и его вектор импульса по выходе электрона из щели может принять любое направ-

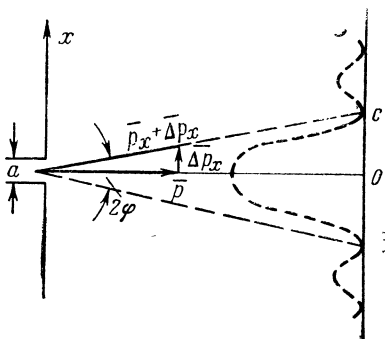


Рис. 2-2. Прохождение пучка электронов через узкую щель.

ление, определяемое пределами угла расхождения пучка от $\varphi_{\text{мин}}=0$ до $\varphi_{\text{макс}}=\lambda/a$. Так как согласно де Бройлю $\lambda=2\pi h/p$, то $\varphi_{\text{макс}}=2\pi h/pa$, или, принимая во внимание, что $p\varphi_{\text{макс}}$ (точнее, $p \sin \varphi_{\text{макс}}$) равно Δp_x , т. е. величине максимального изменения импульса, и $a=\Delta x$, получим соотношение

$$\Delta p_x \Delta x \approx h.$$

Связь этого соотношения с корпускулярно-волновой природой частиц сразу же выявляется при рассмотрении двух предельных случаев.

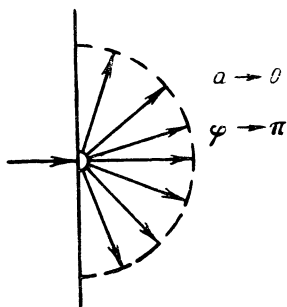


Рис. 2-3. Прохождение пучка электронов через диафрагму при условии, что $a \rightarrow 0$.

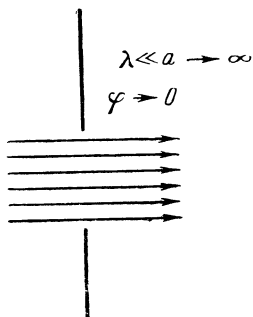


Рис. 2-4. Прохождение пучка электронов через диафрагму при условии, что $a \gg \lambda$.

а) Случай $a \rightarrow 0$. Частицы по выходе из щели расходятся во все стороны в пределах угла $\varphi=180^\circ$ (рис. 2-3). Таким образом, точная локализация частицы в бесконечно узкой щели влечет за собой по выходе ее из щели полную неопределенность в значении импульса ($\Delta p_x \rightarrow \infty$).

б) Случай $a \gg \lambda$. Дифракция при этом практически отсутствует и по выходе из щели частицы продолжают двигаться прямолинейно, т. е. при этом $\varphi \rightarrow 0$ и, следовательно, $\Delta p_x \rightarrow 0$ (рис. 2-4).

Итак, выражение $\Delta p_x \Delta x \approx h$, полученное на основе приведенного выше опыта, говорит о следующем: в результате измерения положения частицы с помощью щели, дающего ошибку Δx , неопределенность импульса частицы оказывается равной:

$$\Delta p_x \approx \frac{h}{\Delta x}.$$

Сущность соотношения неопределенностей для энергии и времени. Что касается соотношения $\Delta E \Delta t \approx h$, то оно может быть определено следующим образом: погрешность измерения энергии ΔE определяется интервалом времени

$$\Delta t \approx \frac{h}{\Delta E},$$

в течение которого может быть произведено данное измерение.

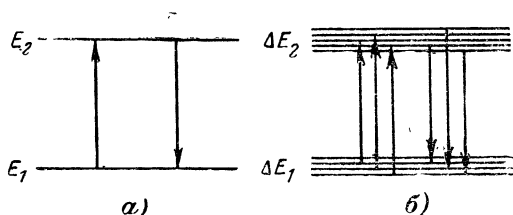


Рис. 2-5. К пояснению принципа неопределенности и его связи с шириной энергетических уровней.

На последнем выражении необходимо остановиться подробнее, так как оно имеет непосредственное отношение к квантовым излучательным переходам. С этой целью обратимся к системе с двумя энергетическими уровнями (рис. 2-5). Если уровни имеют бесконечно малую ширину (рис. 2-5,а), то погрешность в определении разности (энергии излучения) $E_2 - E_1$ будет равна нулю, т. е.

$$\Delta(E_2 - E_1) = 0,$$

а следовательно, согласно соотношению

$$\Delta(E_2 - E_1) \Delta t \approx h$$

интервал времени Δt , необходимый для измерения энергии $E_2 - E_1$, будет стремиться к бесконечности. Указанный интервал времени Δt является также временем жизни микрочастиц на уровне E_2 . Очевидно, что этот случай соответствует монохроматическому излучению, частота которого равна:

$$\omega = \frac{E_2 - E_1}{h}.$$

Из приведенных выше рассуждений видно, что такой случай наблюдаться на практике не может. Реальными случаями являются те, при которых ширина уровней будет иметь конечное значение (рис. 2-5,б). При этом неопределенность в величине энергии излучения будет отлична от нуля, а время жизни частиц на уровне E_2 (т. е. в возбужденном состоянии) может быть определено из приближенного равенства:

$$\Delta t \approx \frac{h}{\Delta(E_2 - E_1)}.$$

Очевидно, что излучение в данном случае будет носить характер волнового пакета. Из рассмотрения соотношения $\Delta(E_2 - E_1)\Delta t \approx h$ легко, в частности, составить представление о том, в каких случаях можно пренебрегать конечностью акта излучения и считать его приближенно монохроматическим.

Квантовая и классическая теории. Соотношениями неопределенностей устанавливаются пределы применимости классического способа описания процессов вне зависимости от точности методов измерений. Иными словами, если предельная точность данного измерения классического объекта значительно ниже той, которая определяется соотношением неопределенностей, то можно считать вполне закономерным описание процесса с помощью обычных уравнений классической механики. Это условие иногда записывают как $\hbar \rightarrow 0$, что означает возможность пренебрежения в квантовых уравнениях движения слагаемыми, содержащими в качестве множителя постоянную \hbar .

Таким образом, квантовая теория не отвергает классическую теорию, а лишь определяет границы применимости последней. Указанный выше предельный переход ($\hbar \rightarrow 0$) является иллюстрацией справедливости известного в физике принципа соответствия, который Бор успешно использовал при построении приближенной теории атома. Согласно этому принципу новые закономерности и соотношения, являясь более общими и более глубокими по сравнению с ранее существовавшими, включают в себя последние как частные случаи, получаемые обычно в результате предельных переходов.

Итак, соотношения Гейзенберга справедливы для любых материальных процессов, но в макроскопической области они теряют практический смысл, о чем красно-

речиво свидетельствуют следующие цифры. Например, для массы в 1 кг ошибка в определении скорости, равная 1 м/сек, влечет за собой, согласно соотношению неопределенностей, ошибку в положении массы, равную приблизительно 10^{-34} м, что составляет ничтожную долю размера атома («радиус» которого оценивается величиной порядка 10^{-8} см). Если же в качестве объекта взять электрон, движущийся в атоме (масса которого составляет приблизительно 10^{-30} кг), то ошибка в определении его положения, при приведенных выше условиях, окажется равной величине «радиуса» атома, т. е. будет относительно большой.

Опираясь на соотношения неопределенностей, можно подчеркнуть принципиальное отличие квантовой механики от классической. Основой классической механики является описание поведения любой системы, определяемого положением всех составляющих ее элементов и изменением этого положения во времени. Такое описание основывается на принципиальной возможности точной локализации всех частей и элементов системы в каждый момент времени, т. е. возможности кинематического (геометрического) описания ее поведения вне зависимости от тех динамических величин, которые управляют этими процессами. Таким образом, в качестве основы здесь выступает кинематика, характеризующая пространственно-временное поведение системы. Динамические ее характеристики, связанные с такими понятиями, как сила, импульс, энергия и т. п., являются как бы вторичными величинами, образующимися с помощью понятия скорости.

Такое раздельное описание кинематических и динамических сторон процесса движения оказалось возможным лишь для макроскопических систем. Оно связано с двумя условиями: во-первых, с принципиальной возможностью определять с любой точностью и независимо друг от друга начальные значения любых физических величин, характеризующих данный процесс и, во-вторых, с тем, что при наблюдениях или при измерениях в рассматриваемый процесс вносятся столь малые возмущения, что ими можно свободно пренебречь. Только при этих условиях мы можем одновременно определять как положение материальных точек системы, так и их скорости (импульсы). Иными словами, в данном случае величины Δq и Δp становятся несоизмеримо малыми по

сравнению с величинами q и p , определяющими мгновенное состояние системы.

В свете приведенных выше рассуждений можно утверждать, что соотношения неопределенностей остаются справедливыми и для области макроявлений, но в этих случаях они не играют практически никакой роли. В связи с этим можно сделать вывод о том, что истинным критерием того, является ли данный процесс макроскопическим или микроскопическим (квантовым), должно явиться отношение \hbar/S , где S — величина действия рассматриваемого процесса в целом.

Из рассмотрения вопросов, связанных с соотношением неопределенностей, можно сделать такой вывод: для микропроцессов, где имеют силу соотношения неопределенностей, мы можем пользоваться либо лишь понятием положения частицы, либо понятием импульса частицы.

Таким образом, мы приходим к дилемме: если удастся точно определить положение частицы ($\Delta q \rightarrow 0$), то мы ничего не будем знать о ее импульсе ($\Delta p \rightarrow \infty$) и, наоборот, если будет точно известен импульс, то положение частицы окажется полностью неопределенным. Если же, наконец, пойдем на то, чтобы определить положение частицы, с заданной долей неопределенности, то с какой-то неопределенностью мы будем знать о ее импульсе. Повышение точности в знании одной переменной ведет к понижению точности в знании другой, и наоборот. Такова «плата» за то, чтобы описать микропроцесс на языке классической механики.

Отсюда, в частности, следует, что если в классической механике наличие координат и скоростей системы позволяет точно описать ее поведение во времени и пространстве, то описание квантовой системы является менее детальным, так как число точно измеряемых величин при прочих равных условиях здесь меньше. Таким образом, является естественным, что предсказание поведения квантовой системы должно носить не достоверный, а лишь вероятностный характер.

2-3. ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕРЕНИЯ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Роль измерительного прибора. Специфичность квантовых явлений, связанных с их корпускулярно-волновой природой, накладывает своеобразный отпечаток на про-

цесс измерения величин, характеризующих квантовую систему и делает особенно важной роль измерительного прибора.

Любой измерительный прибор, которым практически мы можем пользоваться, вне зависимости от природы и характера процесса, является по самой своей сути макроскопическим устройством. О макроскопичности прибора, представляющего собой последовательное соединение двух его частей — анализатора и детектора, судят по конечным результатам ее действия, которые реализуются на выходе детектора. Таким образом, под «макроскопичностью» измерительного прибора следует понимать его свойство давать на выходе информацию о процессе в таком виде, который непосредственно может быть воспринят нашими органами чувств.

Когда речь идет об измерении в макроскопической области, точность измерения в принципе может быть получена сколь угодно высокой, так как возмущение измеряемого процесса самим актом измерения, с точки зрения классических представлений, считается отсутствующим (или, во всяком случае, точно учитываемым).

Вопрос о возмущении при измерении в квантовой области становится крайне существенным. В данном случае возмущение процесса является неустрашимым, как бы естественным, превращающим процесс измерения и оценку его результата в нечто совершенно новое и принципиально отличное от того, что мы имеем в классическом случае. Действительно, при измерении квантовых объектов прибор превращается в активного участника процесса, своего рода «посредника» между объектом и наблюдателем.

Таким образом, здесь мы имеем дело с новым типом измерений, при котором измерению подвергается не изолированный объект — квантовая частица или их ансамбль, а единая сложная система, состоящая из квантового ансамбля и измерительного прибора. Только такое измерение и получаемый при этом результат имеют в квантовой области физический смысл.

Следует подчеркнуть, что и в классической физике любой процесс оценивается по результату взаимодействия объекта с измерительным прибором. Однако если в данном случае независимость измеряемого процесса от акта измерения обязана тому, что прибор практически не влияет на измеряемый процесс, то в квантовом слу-

чае говорить об этом вообще нельзя, ибо такая постановка вопроса лишена физического смысла. Правильная оценка роли прибора в квантовых измерениях заключается в следующем утверждении: измерительный прибор является одним из составляющих внешних макроскопических условий, создающих вместе с измеряемым микрообъектом единый объект. При этом все, что относится к макроскопической части этого процесса, должно описываться классическим способом.

Результатом измерения является реакция прибора (как и обычно) на взаимодействие его с измеряемым микрообъектом (например, след в камере Вильсона, почернение фотопленки при попадании на нее фотона и т. п.). Из анализа таких взаимодействий делаются выводы о свойствах микрообъекта и возможного его поведения и в дальнейшем. Очевидно, что в принципе результаты взаимодействия и предсказание «будущего» системы должны носить случайный характер, а потому должны подчиняться вероятностным, а не детерминированным (в классическом смысле) законам. Именно последнее и является наиболее характерным отличием квантовых систем от классических.

Полное измерение. Другим специфическим свойством квантовых измерений, обусловленным двойственной природой микрочастиц, является следующее. Мы можем осуществлять одновременно лишь определенную группу измерений, касающуюся либо кинематической, либо динамической стороны процесса. Это приводит к тому, что проведение лишь какой-либо одной из этих групп измерений является для квантовых систем полным измерением. Очевидно, что таких несовместных друг с другом полных наборов измерений может быть несколько. Так, например, можно говорить о полном наборе величин, характеризующих положение частиц, или о полном наборе величин, характеризующих их импульсы, и т. п. Очевидно, что создать условия, при которых была бы обеспечена возможность одновременных и независимых друг от друга измерений обеих сторон квантового процесса, в принципе невозможно и поэтому требование такого комбинированного наблюдения неправомерно. Это существенно отличает квантовую область от классической, в которой это не только возможно, но и необходимо для получения полной характеристики измеряемого процесса.

Из описанных выше свойств квантовых частиц вытекает ряд важных следствий, одним из которых является расширение и обобщение классического понятия относительности в применении к системам отсчета, состоящее в следующем. Если при описании макроскопических процессов несовместным являются различные координатные системы (системы отсчета), то в случае квантовых процессов к этому условию необходимо присоединить еще несовместность различных средств наблюдения (измерения). Иными словами, так же как нелегко описать одного и того же классического процесса одновременно в двух и более различных системах координат, которые по сути дела исключают друг друга, так для квантовых процессов взаимоисключающими являются не только две системы отсчета, но и два различных средства наблюдения (измерения).

В связи со сказанным выше становится ясным, что для квантовых измерений характерна неоднозначность их результатов. Серия измерений какой-либо величины при одних и тех же внешних условиях приводит к статистике, соответствующей определенному распределению вероятностей получения при измерении тех или иных значений физической величины. Очевидно, что лапласовский (классический) детерминизм уступает здесь место детерминизму вероятностному. При этом принцип причинности, очевидно, сохраняется, хотя он приобретает новую форму.

Два типа измерения. Для того чтобы сделать некоторые обобщающие выводы в отношении понятия «состояния» квантовой системы, необходимо более подробно рассмотреть саму «технику» квантовых измерений. Измерение квантовых систем состоит из двух частей (этапов). Первая часть (называемая также начальным опытом) заключается в подготовке системы к измерениям (например, получение пучка молекул или пучка электронов с определенной энергией) и создание требуемых внешних условий (например, пропускания молекул через коллиматор или пучка электронов через кристалл). Цель такой подготовки — это получение исходных данных для предсказания возможных состояний системы в будущем, т. е. предсказания всей совокупности потенциальных возможностей, последовательная реализация которых осуществляется на втором этапе измерения. Эта вторая часть измерения (называемая также поверочным

опытом) состоит в регистрации результата взаимодействия измеряемой системы с прибором, при котором каждый раз реализуется одна из потенциальных возможностей, предсказанных на первом этапе измерений.

Таким образом, если первый этап измерений относится к «будущему» системы, то результаты второго этапа регистрируют ее «прошлое». Многократное повторение таких измерений при одних и тех же макроскопических условиях дает статистику для измеряемых величин, а по ней определяется распределение вероятностей появления этих величин при условиях, созданных на первом этапе измерений. При этом каждое полное измерение приводит систему к одному из потенциально возможных ее состояний.

Таким образом, вся совокупность потенциальных возможностей; предсказанная на первом этапе измерений и реализуемая на втором этапе в виде полного набора физически наблюдаемых величин и представляет собой то, что называют **состоянием квантовой системы**. К затронутым в этом параграфе вопросам мы еще вернемся при рассмотрении свойств ансамблей квантовых частиц.

2.4. ОСНОВНОЕ УРАВНЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ (УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА)

Плоские волны и волновые пакеты. Для количественного описания движения частиц, обладающих корпускулярно-волновыми свойствами, необходимо найти уравнение, которое являлось бы для них такой же основой, как и уравнения Ньютона для классических частиц или уравнения Максвелла для волновых процессов. Предпосылкой к составлению такого уравнения оказалось достаточно. Действительно, с одной стороны, был известен вид решения для монохроматической волны, с другой — связь между величинами, характеризующими частицу и как корпускулу и как волну. Эта связь дана в виде уже известных нам соотношений:

$$E = \hbar\omega; \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}.$$

Таким образом, явилось естественным описать с учетом приведенных выше соотношений движение свободной частицы (например, электрона) в виде плоской монохроматической волны.

Для обычной волны имеем:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ce^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}.$$

Для частицы с учетом приведенных ранее соотношений эта функция примет вид:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ce^{i\left(\frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{h} - \frac{Et}{h}\right)}.$$

Такой вид решения волнового уравнения полностью удовлетворяет соотношению неопределенностей для частного случая, когда точно известен импульс частицы при полной неопределенности ее пространственного положения.

Так как была ясна принципиальная невозможность (в силу соотношения Гейзенберга) найти такое же простое решение для общего случая, де Бройль предложил использовать метод суперпозиции монохроматических волн. Суперпозиция должна была, по его мнению, также удовлетворять соотношению неопределенностей. Такое решение вопроса казалось правильным и крайне удачным, к тому же формально полностью согласующимся с соотношением неопределенностей. Действительно, другой предельный случай — точная локализация частицы в пространстве с полной неопределенностью ее импульса — мог быть представлен суперпозицией бесконечного числа гармонических волн, образующих сплошной спектр с равномерно распределенной амплитудой, т. е. пакетом волн в виде импульсной функции (функции Дирака). Уверенность в правильности такого представления подкреплялась еще и тем, что групповая скорость пакета оказывалась в точности равной скорости частицы. Все промежуточные случаи между этими двумя предельными также явились прекрасным подтверждением соотношения неопределенностей.

Однако дальнейшее развитие этих идей было приостановлено в связи со следующим обстоятельством. Оказалось, что частица, представленная в виде волнового пакета, является крайне неустойчивым образованием. При своем движении пакет, изображающий частицу, расплывается (рис. 2-6), причем это явление происходит в любых случаях, независимо от свойств среды или каких-либо других факторов. Такое свойство рас-

плывания волнового пакета, отождествляющего частицу, учитывается следующим соотношением:

$$\Delta x \Delta k = \sqrt{1 + \alpha^2 t^2 (\Delta k)^4},$$

где $\alpha = (\partial^2 \omega / \partial k^2)_{k=k_0}$ и k_0 соответствует центральной частоте ω_0 ;

t — текущее время.

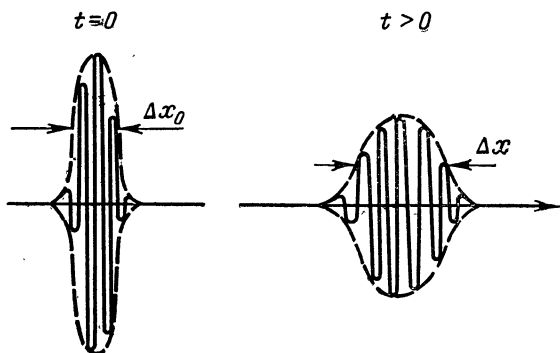


Рис. 2-6. Расплывание волнового пакета, изображающего квантовую частицу.

В то же время для классического волнового пакета произведение $\Delta x \Delta k$ от времени не зависит:

$$\Delta x \Delta k \approx 1.$$

В. А. Фок [Л. 34] поясняет расплывание частицы со временем следующим образом. Если в момент $t=0$ соотношение неопределенностей для средних значений x и p частицы может быть записано в виде

$$(\Delta x)_0 (\Delta p)_0 = \frac{\hbar}{2},$$

то к некоторому моменту времени $t > 0$ среднее значение координаты частицы, с учетом того, что частица движется со скоростью $v = p_0/m$, будет равно не x_0 , а

$$x_t = x_0 + \frac{p_0}{m} t.$$

Таким образом, неопределенность в координате с течением времени будет возрастать вследствие неопределенности в скорости

$$\Delta v = \frac{\Delta p}{m}.$$

Очевидно, что результирующая неопределенность в координате будет складываться из начальной неопределенности $(\Delta x)_0$ и из неопределенности $(\Delta p)/mt$, накопившейся за время t . По закону сложения независимых погрешностей получим:

$$\Delta x = \sqrt{(\Delta x)_0^2 + \left(\frac{\Delta p}{m} t\right)^2}.$$

Поиски волнового уравнения. Дальнейший анализ свойств волн де Бройля окончательно убеждает в том, что Ψ не является волновой функцией в обычном смысле этого понятия, т. е. величиной, с помощью которой можно непосредственно описывать какие-либо физические свойства материальной частицы. Л. Шифф [Л. 37] в качестве обоснования к составлению уравнения, адекватного квантовым процессам, приводит следующие рассуждения.

Выше уже указывалось, что правильность уравнения прежде всего должна быть подтверждена результатами опыта по дифракции частиц и возможностью предельного перехода от квантовых процессов к процессам классической механики. Первое, что было сделано на этом пути, это чисто волновое описание частицы, движущейся в некотором направлении (например, в направлении положительных x) с полностью неопределенной координатой, но точно известными импульсами, а следовательно, и частотой. Такая волна, как известно, может быть представлена в виде функций вида

$$\cos(kx - \omega t); \quad \sin(kx - \omega t); \quad e^{i(kx - \omega t)}$$

или их линейной комбинации. В последнем случае, как это мы уже видели, частица ассоциируется с волновым пакетом, центр которого движется с групповой скоростью, равной скорости частицы.

Для окончательного суждения пригодности волновых уравнений для описания поведения частицы необ-

ходимо было, чтобы они удовлетворяли следующим требованиям:

1) уравнения должны быть линейными, обеспечивающими интерференцию и образование волновых пакетов;

2) решения могут быть как простые гармонические, так и более сложные;

3) постоянные коэффициенты не должны содержать параметров, характеризующих само движение (импульс, энергию, волновое число и т. п.), а могут содержать лишь такие, как \hbar , массу, заряд частицы и т. п.

Последнее требование было решающим. Оно явилось следствием того, что в некоторых случаях необходимо наложение решений, содержащих различные параметры движения, а это сделать невозможно, если постоянные уравнения явным образом зависят от этих параметров. В частности, этому требованию не удовлетворяет обычное волновое уравнение:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \gamma \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2},$$

так как оно может быть удовлетворено лишь в том случае, если

$$\gamma = \frac{\omega^2}{k^2} = \frac{E^2}{p^2} \text{ или } \gamma = \frac{p^2}{2m^2}.$$

Но параметр γ не должен зависеть ни от E , ни от p .

Поэтому этот вид уравнения оказался непригодным.

Анализируя соотношения между E и p , с одной стороны, и ω и k — с другой, легко прийти к выводу, что третье условие будет удовлетворено в том случае, если принять уравнение следующего вида:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}.$$

Решением этого уравнения является функция либо $e^{i(kx - \omega t)}$ либо $e^{-i(kx - \omega t)}$, но не обе одновременно, т. е. не $\cos(kx - \omega t)$ и не $\sin(kx - \omega t)$! Действительно, исходя из указанного выше решения, принимающего вид $e^{i\left(\frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)}$, в нашем случае вид $e^{i\left(\frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)}$, находим:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}. \quad (2-2)$$

В этом уравнении параметр γ удовлетворяет поставленному выше требованию быть независимым от параметров движения (p и E). Если сравнить это уравнение с известными уравнениями математической физики, то увидим, что оно по виду совпадает с уравнением диффузии, описывающим процессы выравнивания какой-либо величины:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = k \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}. \quad (2-3)$$

Однако между этим уравнением и полученным выше есть одно существенное отличие. В то время как множитель в уравнении (2-3) величина положительная и вещественная, в уравнении (2-2) она чисто мнимая. Вследствие этого уравнение (2-2) имеет периодические решения, в то время как уравнение диффузии таких решений не имеет. Этот результат был несколько неожиданным и привел, как известно, к специфической трактовке волновой функции, а следовательно, и тех физических явлений, которые она описывает. Об этом подробнее будет сказано в следующем параграфе.

Полученное выше уравнение является основным уравнением квантовой механики — уравнением Шредингера.

Уравнение (2-2) можно обобщить на случай трех измерений:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi, \quad (2-4)$$

где

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Стационарное уравнение Шредингера. Для стационарного режима, соответствующего стоячим монохроматическим волнам, т. е. свободно движущимся частицам, решение уравнения может быть произведено методом разделения переменных, т. е. представлением его в виде произведения двух независимых функций:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \varphi(t).$$

Подставим это решение в уравнение (2-4) и разделим обе части последнего на $\psi(x, y, z) \varphi(t)$, тогда

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = i \frac{\hbar}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = E,$$

где E — постоянная разделения, являющаяся энергией системы.

Таким образом, мы получим два независимых уравнения:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E\psi; \quad (2-5)$$

$$\hbar i \frac{\partial \varphi}{\partial t} = E\varphi. \quad (2-6)$$

Первое из них (2-5) называют стационарным уравнением Шредингера или уравнением амплитуды волновой функции. Его можно переписать в таком виде:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0.$$

Если частица находится в поле потенциальных сил, то кинетическая энергия должна быть записана в виде $T = E - U$, где U — потенциальная энергия частицы. В этом случае стационарное уравнение Шредингера принимает следующий вид:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0.$$

Уравнение (2-6) после интегрирования дает следующий результат:

$$\varphi(t) = e^{-i \frac{E}{\hbar} t}.$$

Таким образом, искомую функцию $\Psi(x, y, z, t)$ можно записать в виде

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}.$$

2-5. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ

Отказ от классического толкования волновых свойств микрочастицы. Выше мы отмечали, что попытка рассматривать микрочастицу как образование из группы волн потерпела неудачу. Эта концепция, носившая чисто классический характер, оказалась несостоятельной. Прежде всего, частица, представленная пакетом волн, обнаруживает неустойчивость, так как даже при движении

в вакууме этот пакет неограниченно увеличивается в своих размерах, т. е. частица как бы расплывается. Далее, если рассматривать электрон как волну, то после прохождения его через систему дифракционных щелей, он будет представлять собой уже группу волн, которые можно направить по различным путям, разделив таким образом частицу на части и нарушив тем самым основной принцип неделимости электрона. Опыт же говорит о том, что частица после прохождения щели может попасть либо на один прибор, либо на другой, но никогда одновременно на оба прибора.

Равным образом нужно было отвергнуть и другую точку зрения, а именно что волны являются совокупностью частиц, так как экспериментально доказано, что каждый из электронов диафрагирует независимо друг от друга. Поэтому существование волновых явлений нельзя связывать с необходимостью участия одновременно большого числа частиц. Об этом говорят, в частности, волновые явления в атомах, где число электронов невелико.

В связи с этим заметим, что решения уравнения Шредингера получаются в виде комплексных функций. Этот результат следует отличать от того, который получается при применении так называемого комплексного метода, когда в конечном счете используется либо действительная, либо мнимая части решения, но никогда обе. Здесь же комплексность решений вытекает из самого вида уравнения. В то же время такие решения не могут непосредственно относиться ни к физически наблюдаемым величинам, ни к вероятностям их распределения, ибо и те, и другие выражаются через действительные числа.

Вероятностная трактовка волновой функции. Правильное толкование смысла волновой функции было дано М. Борном. Он пришел к выводу, что интенсивность волн де Бройля в каком-либо месте пропорциональна вероятности обнаружить частицу в этом месте. Таким образом, если имеется в виду один электрон, то интенсивность волны (т. е. квадрат волновой функции) указывает на вероятность попадания электрона в определенную точку пространства. Отсюда видно, что волны де Бройля существенно отличаются от волн классической физики. Величина $\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$ означает не плотность какой-либо физической величины в смысле классической теории, а плотность вероятности этой величины, на-

пример вероятности найти частицу в единице объема в данный момент времени. Однако такая трактовка волновой функции, характеризующая вероятность пространственного положения частицы, не является единственно возможной. Можно с таким же успехом в качестве основной величины, описывающей поведение частицы, взять не координату, а импульс, и говорить в этом случае о вероятностных значениях импульса частицы в каждый момент времени.

В более общем случае можно говорить о координатах частицы, понимая под последними обобщенные координаты любого конфигурационного пространства, в котором описывается движение частицы. Поэтому в дальнейшем мы будем иногда обозначать волновую функцию в виде

$$\Psi = \Psi(q_i, t),$$

где под q_i следует понимать ту или иную обобщенную координату или их совокупность.

Таким образом, произошло как бы восстановление в новой расширенной интерпретации понятия о траектории как геометрическом месте точек, в которых потенциально с той или иной вероятностью может находиться частица или в общем случае принимать значения та или иная величина, характеризующая ее движение в конфигурационном пространстве.

Из сказанного следует, что термин «волна» с физической точки зрения является понятием условным и неоднозначным, в то время как в математическом отношении оно достаточно универсально. Действительно, математически оно означает лишь то, что имеется какая-то определенная характеристическая величина (в рассмотренном нами выше примере она является волной вероятности), поведение которой (или ее квадрата) во времени и пространстве описывается волновыми функциями.

Итак, плотность вероятности того или иного состояния частицы определяется интенсивностью волны, т. е.

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi,$$

где Ψ^* — функция, комплексно сопряженная с функцией Ψ .

Таким образом, можно установить, что если внутри элементарного объема $dV = dq_1 dq_2 \dots dq_n$ * функция

* Для одной частицы величина dV будет элементом обычного трехмерного объема, т. е. $dV = dx dy dz$.

$\Psi = \text{const}$, то вероятность найти частицу в этом объеме равна:

$$dW = |\Psi|^2 dV.$$

Величина

$$\frac{dW}{dV} = |\Psi|^2$$

является плотностью вероятности. Вероятность найти частицу в некотором объеме V , очевидно, будет определяться как

$$W = \int_V dW = \int_V |\Psi|^2 dV.$$

Если область V является тем объемом, за пределы которого заведомо частица выйти не может, то такая вероятность превращается в достоверность, т. е.

$$W = \int_V \Psi^* \Psi dV = 1.$$

Это условие называется условием нормировки, а функция Ψ — нормированной функцией. В общем случае условие нормировки обычно записывается в виде

$$W = \int_0^\infty \Psi^* \Psi dV = 1.$$

Принцип суперпозиции. В силу линейности уравнений Шредингера к ним применим принцип суперпозиции. Этот принцип может быть сформулирован следующим образом: если какая-либо система (частица или их совокупность) может находиться как в состоянии Ψ_1 , так и в состоянии Ψ_2 , то она может находиться и в состоянии, изображаемом функцией

$$\Psi(q_i, t) = c_1 \Psi_1(q_i, t) + c_2 \Psi_2(q_i, t),$$

где c_1 и c_2 — произвольные (в общем случае комплексные) числа.

Функция Ψ может быть разложена по ортогональным собственным функциям, т. е.

$$\Psi(q_i, t) = \sum_n c_n \Psi_n = \sum_n c_n \psi_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t},$$

где $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ составляет полную систему ортогональных функций (об этом подробнее — см. 2-9). Такое разложение часто называют спектральным.

Очевидно, для сопряженной функции $\Psi^*(q_i, t)$ можно аналогичным образом написать:

$$\Psi^*(q_i, t) = \sum_m c_m^* \psi_m^* e^{i \frac{E_m}{\hbar} t}.$$

Если значения E изменяются непрерывно, то суммирование надо заменить интегрированием:

$$\Psi(q_i, t) = \int_E c(E) \psi(E) e^{-i \frac{E}{\hbar} t} dE.$$

Поскольку

$$\Psi(q_i, t) = \psi(q_i) \varphi(t),$$

где $\psi(q_i)$ — амплитуды волновой функции, то для последних также справедливо разложение по ортогональным функциям:

$$\psi(q_i) = \sum_n c_n \psi_n.$$

Аналогичное выражение можно написать для комплексно сопряженной функции

$$\psi^*(q_i) = \sum_m c_m^* \psi_m^*.$$

Каждую функцию ψ_n (амплитуду) также нормируют, т. е. полагают (при том же требовании конечности объема, что и при нормировании ψ), что

$$\int_V \psi_n^* \psi_n dV = 1.$$

Решения уравнения для амплитуд могут быть построены таким образом, что функции состояния будут обладать свойством взаимной ортогональности, что выражается условием

$$\int_V \psi_m^* \psi_n dV = 0 \text{ при } m \neq n,$$

где ψ_m^* — функция, сопряженная с ψ_m .

Оба свойства—нормированность и ортогональность—могут быть объединены и выражены одним интегралом в виде

$$\int_V \psi_m^* \psi_n dV = \delta_{mn},$$

где символ Кронекера

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{при } m = n; \\ 0 & \text{при } m \neq n. \end{cases}$$

Такие функции называются ортонормированными.

Отметим, что исходя из физических соображений волновые функции должны быть непрерывными, однозначными, ограниченными и квадратично интегрируемыми.

Из приведенных выше выражений для $\psi(q_i)$ и $\psi^*(q_i)$ легко составить равенство

$$\int_V \psi^*(q_i) \psi(q_i) dV = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \int_V \psi_m^* \psi_n dV.$$

В силу ортонормированности функций ψ правую часть полученного выражения можно представить в следующем виде:

$$\sum_n |c_n|^2 = 1.$$

Принципиальное отличие квантовых процессов от классических особенно отчетливо выступает при рассмотрении суперпозиции волновых функций. Если в классической теории такие разложения означают одновременное участие всех составляющих, то в квантовой теории одновременно наличие этих составляющих принципиально невозможно: они могут быть выявлены (измерены) лишь поодиночке с различной вероятностью. Эта вероятность, учитывая условие ортонормированности волновых функций, для каждой составляющей равна $|c_n|^2$, а сумма квадратов модулей всех коэффициентов, очевидно, характеризует полную вероятность, т. е.

$$\sum_n |c_n|^2 = 1.$$

Таким образом, для количественной характеристики системы мы можем воспользоваться понятием среднего значения, вычисляемого по правилам теории вероятностей. В частном случае, когда все коэффициенты, кроме одного, например c_k , равны нулю, имеем:

$$\sum_n |c_n|^2 = c_k^2 = 1$$

и, следовательно, речь идет о достоверном событии.

2-6. СТАТИСТИЧЕСКИЕ АНСАМБЛИ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Квантовые ансамбли. Рассмотренные в предыдущем параграфе, вопросы, связанные с суперпозицией волновых функций, имеют принципиально важное значение, позволяющее вскрыть специфические свойства квантовых систем.

Прежде всего мы должны констатировать тот факт, что функция ψ , являющаяся в волновой механике основной величиной, с помощью которой описываются состояния квантовых систем, имеет статистический смысл. Это означает, что поведение квантовых систем может быть определено или предсказано лишь как вероятностное. В данном случае, так же как и при изучении обычных классических систем, могут возникнуть две основные задачи. В одной из них, которая может быть названа прямой задачей, ставится вопрос о предсказании, на основе известной функции ψ , результатов измерений, которые предполагается провести над данной квантовой системой. Вторая задача является обратной по отношению к первой и состоит в определении волновой функции ψ на основе результатов предварительно проведенных измерений.

Так как в обоих случаях речь может идти лишь о статистических решениях, то конечной целью здесь является получение средних значений интересующих величин. Такие величины могут быть получены лишь на основе многократных и независимых друг от друга опытов, проведенных либо с одной и той же системой, либо со многими тождественными системами при одних и тех же внешних (макроскопических) условиях. На практике в подавляющем большинстве случаев имеют дело не с одной многократно испытываемой системой, а с мно-

жеством одинаковых микросистем, называемых квантовыми ансамблями.

Такое множество микросистем можно рассматривать в целом как некоторую макроскопическую систему. Состояние этой системы будет полностью определяться поведением, оцениваемым некоторыми средними величинами, отдельных ее элементов — микросистем. И, наоборот, в силу эргодичности процесса поведение ансамбля в среднем, позволит вынести суждение о вероятностном поведении каждого отдельного члена такого ансамбля в целом. Следует отметить, что под тождественностью микросистем понимается полная их идентичность с точки зрения лишь макроскопических условий, в которых находятся микросистемы. Однако их индивидуальное поведение, характеризующееся микроскопическими отклонениями, может быть различным, но не нарушающим их тождественность с точки зрения усредненных эффектов, которыми определяется состояние ансамбля в целом.

Наиболее простой моделью квантового ансамбля является такая, в которой можно пренебречь энергией взаимодействия между отдельными ее членами как несоизмеримо малой по сравнению с полной энергией каждой микросистемы.

Таким образом, на основе введенных выше понятий и ограничений квантовый ансамбль можно охарактеризовать как совокупность тождественных микросистем, находящихся в одинаковых макроскопических условиях (объем, температура, давление, внешнее поле и т. д.). Среднее значение любой величины, характеризующее состояние квантового ансамбля, называют средним по ансамблю.

При измерении квантовых ансамблей может встретиться два случая. Начнем с рассмотрения первого.

Чистые ансамбли. Предположим, что состояние каждой частицы может быть одной и той же волновой функцией ψ . В этом случае полные измерения какой-либо величины L может дать некоторый набор их значений L_i . Если в результате N измерений установлено, что N_1 раз состояние системы определялось значением L_1 , N_2 раз значением L_2 и т. д., то среднее по ансамблю значение равно:

$$\langle L \rangle = \sum_i w_i L_i,$$

где $w_i = N_i/N$ — вероятность появления при измерении значения L_i .

Может представиться частный случай, когда все w_i , за исключением одного, например w_n , равны нулю. Тогда

$$\langle L \rangle = L_n,$$

т. е. среднее значение L равно лишь одному из возможных значений L_i . Это говорит о том, что все частицы такого ансамбля описываются одной и той же функцией ψ_n , являющейся одной из собственных функций, по которым может быть разложена волновая функция данного ансамбля.

Описанные здесь оба случая относятся к так называемому ансамблю чистых состояний (более коротко называемому чистым ансамблем, или чистым состоянием).

В качестве дополнительной характеристики квантовых ансамблей отметим следующее их свойство.

При измерении чистого ансамбля, характеризовавшегося вначале (до измерения) волновой функцией ψ , мы получим ряд значений L_i , каждое из которых соответствует одной из собственных функций ψ_i . Таким образом, можно констатировать, что каждое измерение приводит систему к новому состоянию. Поэтому для точного воспроизведения уже проделанного измерения необходимо возратить систему в исходное состояние, т. е. создать для измерения первоначальные условия.

Смешанные ансамбли. Очевидно, что в результате проведения над системой полного цикла измерений определенной величины мы получим новый ансамбль, характеризующийся тем, что его частицы разбились на группы, обладающие различными состояниями ψ_i . Каждую частицу такого сложного ансамбля уже нельзя описать какой-либо одной волновой функцией. Это объясняется тем, что каждая группа частиц, образующая подансамбль, будет обладать своей волновой функцией, причем зависящей не только от координат q своего подансамбля, но и координат q' всех остальных подансамблей. С математической точки зрения это означает следующее. Если даже частицы различных подансамблей являются не взаимодействующими друг с другом, все равно невозможно подобрать такую функцию $\psi(q, q')$, которую можно было бы представить в виде произведе-

ния двух независимых друг от друга функций, т. е.

$$\psi(q, q') = \psi_1(q) \psi_2(q').$$

В этом случае повторные многократные измерения (при одних и тех же начальных условиях) приводят к различным результатам, а именно дают ряд средних значений. Например, $\langle L^{(1)} \rangle$, $\langle L^2 \rangle$, ..., $\langle L^{(n)} \rangle$ с вероятностью появления каждого из них соответственно ω_i , где $\sum_i \omega_i = 1$. Повторяем, что такой результат говорит о том, что данный ансамбль состоит из нескольких групп макросистем, включающих соответственно N_1, N_2, \dots, N_n микросистем, где $\sum_i N_i = N$ — общее число микросистем, а $i = 1, 2, \dots, n$. Каждая частица той или иной группы (подансамбля) описывается своей волновой функцией $\psi^{(i)}$.

Таким образом, можно утверждать, что в данном случае мы имеем дело одновременно с рядом ансамблей чистых состояний, в общем случае взаимодействующих друг с другом и сведенных в единую систему. Такой сложный ансамбль чистых состояний называют ансамблем смешанных состояний. Поскольку непосредственное использование волновой функции для описания состояния смешанного ансамбля невозможно, применяют другую, более сложную функцию, называемую матрицей плотности, описание которой дано в § 2-21.

Ансамбли и информация. Отметим, что при измерении чистого ансамбля мы извлекаем из него большую информацию о состоянии системы, чем в случае смешанного ансамбля. Это объясняется тем, что в первом случае, представив волновую функцию суперпозицией собственных функций ψ_n

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n,$$

мы полностью знаем коэффициенты $c_n = |c_n| e^{i\alpha_n}$, т. е. их модули и фазы, в то время как в случае смешанных ансамблей располагаем лишь абсолютными значениями квадратов модулей, т. е. $|c_n|^2$. Указанное здесь отличие одного случая от другого может быть пояснено следующим примером. Чистое состояние, описываемое функцией ψ , можно представить, как это было сказано выше,

в виде суперпозиции чистых состояний (собственных функций):

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n.$$

Очевидно, что для комплексно сопряженной функции ψ^* можно написать аналогичное выражение:

$$\psi^* = \sum_m c_m^* \psi_m^*.$$

Тогда для плотности вероятности получим выражение:

$$\omega_i = \psi^* \psi = |\psi|^2 = \sum_n |c_n \psi_n|^2 + \sum_{m \neq n} \sum_n c_m^* c_n \psi_m^* \psi_n.$$

Второй член правой части этого равенства, определяющий «интерференцию» состояний, оказывается в общем случае отличным от нуля. В случае же смешанных состояний интерференционный член пропадает и плотность вероятности становится равной

$$\omega_i = \sum_i |\psi^{(i)}|^2, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

где $\omega_i = |\psi^{(i)}|^2$ — плотность вероятности того, что система находится в состоянии, определяемом функцией $\psi^{(i)}$.

Таким образом, состояния, определяемые чистым и смешанным ансамблем, можно уподобить соответственно когерентным и некогерентным колебаниям, т. е. таким, когда можно складывать соответственно либо амплитуды, либо только мощности.

2-7. КВАНТОВАНИЕ ФАЗОВОГО ПРОСТРАНСТВА МИКРОЧАСТИЦЫ

Явление излучения абсолютно черного тела, рассмотренное нами ранее, связано с участием огромного числа элементарных частиц. Поэтому естественно, что эта проблема рассматривалась как статистическая, и первые попытки решить ее были сделаны на основе законов классической статистики, в частности с привлечением известного из термодинамики закона распределения Больцмана.

Однако такой метод решения привел, как известно, к результату, не согласовавшемуся с данными опыта и тем самым лишний раз подтверждавшему несостоятельность классического подхода к явлениям микромира.

Некоторое видоизменение классической статистики, которое внес Планк введением кванта действия h , касалось в основном характера фазового пространства, в котором рассматривались статистические процессы. Суть этих изменений сводилась к следующему. В классической статистике фазовое пространство (или, раздельно, пространство обобщенных координат и пространство обобщенных импульсов) разбивается на отдельные, произвольные по размерам ячейки. Отношение объема каждой такой элементарной ячейки к всему объему пространства (например, импульсному)

$$g_s = \frac{\Omega_s}{\Omega}$$

называется статистическим весом данной ячейки.

В классическом случае (например, в кинетической теории газов) размеры ячейки в силу непрерывности физических величин не играют никакой роли и в дальнейшем величина g_s из расчета выпадает. Для квантовых же систем дело обстоит принципиально иначе. Дело в том, что для таких систем фазовое пространство дискретно, а не непрерывно как в классическом случае. Поэтому статистический вес ячейки g_s определяется, как это мы видели на примере излучения абсолютно черного тела, числом троек целых чисел n_x, n_y, n_z , находящихся внутри каждой ячейки. Очевидно, что наименьший объем ячейки будет соответствовать одной тройке таких чисел. В связи с этим в квантовой статистике пользуются вместо понятия элементарной ячейки другим, а именно понятием элементарного шарового слоя, с которым мы уже встречались при выводе формул излучения абсолютно черного тела. Напомним, что число собственных колебаний (осцилляторов) в замкнутой полости, которое, очевидно, равно как раз числу ячеек, определялось величиной

$$g_s = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} V d\omega.$$

Так как согласно соотношению де Бройля

$$\lambda = \frac{2\pi h}{p}, \text{ откуда } \omega = \frac{2\pi c}{\lambda} = \frac{pc}{h},$$

то выражение для g_s может быть представлено в виде

$$g_s = \frac{V}{\pi^2 h^3} p^2 dp.$$

Эта формула и дает величину, равную числу элементарных ячеек, содержащихся в шаровом слое импульсного пространства между двумя сферами с радиусами p и $p+dp$. Это выражение может быть получено и иначе, а именно: надо подсчитать число ячеек (собственных колебаний) во всем объеме фазового пространства (т. е. во всем координатном объеме V и в шаровом слое от p до $p+dp$) и разделить его на h^3 , являющимся минимальным из возможных объемов этого пространства.

Однако для вывода формулы Планка введения лишь одного этого ограничения, накладываемого на размеры ячеек фазового пространства, оказалось недостаточно.

2-8. АНСАМБЛИ ИЗ ФЕРМИ-ЧАСТИЦ И БОЗЕ-ЧАСТИЦ

Тождественность микрочастиц. Вывод формулы Планка мог быть получен лишь после того, как Бозе в 1924 г. постулировал особое, чуждое духу классической механике, свойство квантовых частиц, а именно их неразличимость (тождественность). Это новое свойство может быть пояснено следующим образом.

Представим себе ансамбль не взаимодействующих между собой частиц и не потерявших таким образом своих индивидуальных свойств. В этом случае состояние ансамбля как системы в целом может быть описано некоторой волновой функцией, являющейся функцией координат всех частиц данного ансамбля и времени $\Psi(1, 2, \dots, n, t)$, где цифры $1, 2, \dots, n$ относятся к координатам соответствующих частиц.

Если состояние каждой, взятой в отдельности частицы можно описать волновыми функциями $\Psi_1(1, t)$, $\Psi_2(2, t)$, ..., $\Psi_n(n, t)$, то результирующая волновая функция, согласно теореме умножения вероятностей не-

зависимых событий может быть представлена в виде произведения волновых функций:

$$\Psi(1, 2, \dots, n, t) = \Psi_1(1, t) \Psi_2(2, t), \dots, \Psi_n(n, t).$$

Если данный ансамбль состоит из тождественных частиц, что представляет наибольший практический интерес, то здесь возникает специфическая трудность, неизвестная классической статистике. Дело заключается в том, что в силу неразличимости частиц мы не можем мысленно пронумеровать частицы и затем следить за

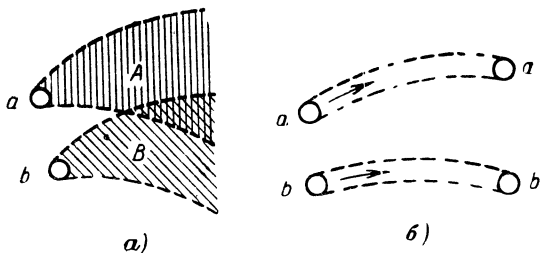


Рис. 2-7. Движение классической и квантовой частиц.

движением каждой из них. Если бы это сделать было возможно, то это означало бы восстановление для квантовых систем понятия траектории, в принципе отвергнутого квантовой теорией.

С физической точки зрения неразличимость квантовых частиц возникает вследствие их свойств с течением времени расплываться в пространстве. Об этом свойстве уже говорилось. Именно это свойство делает понятие траектории для них бессмысленным. Сказанное наглядно иллюстрируется двумя рисунками (рис. 2-7), на которых изображено движение двух классических (рис. 2-7,а) и двух квантовых частиц (рис. 2-7,б). Если в первом случае траектории в процессе их движения четко обозначаются в любой момент времени, то во втором случае в силу указанных выше свойств области возможного нахождения частиц по мере их движения перекрываются и говорить о точной фиксации пространственного положения каждой из них в тот или иной момент времени не представляется возможным.

Отсюда становится ясной принципиальная невозможность их различения в силу одновременного вероятного

сосуществования частиц в перекрывающихся областях.

Таким образом, задача классической статистики об определении, какие именно частицы находятся в том или ином состоянии, превращается в квантовой статистике в задачу о нахождении лишь количественного распределения по состояниям неразличимых друг от друга частиц.

Симметричные и антисимметричные волновые функции. Из сказанного выше вытекает принципиально важное следствие, а именно при перестановке частиц местами, например при переходе первой частицы на место второй и соответственно второй на место первой, состояние системы в целом должно оставаться неизменным, т. е. имеет место следующее тождество, справедливое для любого момента времени:

$$|\Psi(1, 2, \dots, n, t)|^2 = |\Psi(2, 1, \dots, n, t)|^2.$$

Из сказанного следует, что число возможных различных состояний у квантовых систем по сравнению с классическими системами, резко сокращается.

В отношении самих функций Ψ , как это видно из приведенного выше равенства, может представиться два случая, а именно когда при любых перестановках частиц функция знака не меняет, т. е.

$$\Psi(1, 2, \dots, n, t) = +\Psi(2, 1, \dots, n, t),$$

и когда при нечетном числе перестановок функция Ψ изменяет знак на обратный, т. е.

$$\Psi(1, 2, \dots, n, t) = -\Psi(2, 1, \dots, n, t).$$

В первом случае волновые функции называются симметричными и обозначаются через Ψ_s . Они описывают состояния частиц, обладающих целочисленным спином (0, 1, 2, ... в единицах \hbar). К таким частицам следует отнести фотоны, π -мезоны, а также сложные частицы, если в каждой из них число электронов, протонов и нейтронов является четным.

Волновые функции, которые изменяют знак при нечетном числе перестановок частиц местами, называются асимметричными функциями и обозначаются через Ψ_a . Ими описываются состояния ансамблей частиц, обладающих полуцелым спином ($1/2$, $3/2$ в единицах \hbar). К таким частицам, обладающим тем же свойством неразли-

чимости, как и предыдущие, относятся электроны, протоны, нейтроны, μ -мезоны. Их отличием от частиц с целым спином является то, что составленные из них ансамбли подчиняются принципу Паули, о котором подробнее будет сказано ниже. Очевидно, что в данном случае на возможные состояния частиц накладываются еще большие ограничения.

Статистика Бозе — Эйнштейна и Ферми — Дирака. Статистика, построенная на симметричных функциях, была предложена Бозе для фотонов и затем распространена Эйнштейном на любые частицы с целым спином. Такие частицы получили название бозонов, а их ансамбли называют иногда газом Бозе — Эйнштейна.

Закон распределения согласно данной статистике и фигурирует в известной формуле Планка в виде множителя

$$f_{\text{Б-Э}} = \frac{1}{e^{h\omega/kT} - 1}.$$

Таким образом, множители в формуле Планка

$$u(\omega) d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\omega h}{e^{h\omega/kT} - 1} d\omega$$

с фотонной точки зрения можно интерпретировать следующим образом.

Первый множитель

$$\frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$$

представляет собой число фотонов в единице объема в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$. Эту величину называют также числом собственных колебаний или числом типов (мод) колебаний или, наконец, числом радиационных осцилляторов. Произведение двух других множителей является средней энергией, приходящейся на один фотон:

$$\bar{\epsilon} = \frac{h\omega}{e^{h\omega/kT} - 1}.$$

Статистика для ансамблей частиц с полуцелым спином была разработана Э. Ферми и П. Дираком. Она получила название статистики Ферми—Дирака, а описыва-

ваемые ею частицы — название фермионов. Функция распределения Ферми—Дирака имеет вид:

$$f_{\Phi-D} = \frac{1}{e^{E-\mu/kT} + 1},$$

где μ — так называемый химический потенциал.

Интерференция амплитуд волновых функций. К изложенному выше о статистических свойствах квантовых частиц, образующих квантовые ансамбли с существенно различными характеристиками, необходимо добавить еще одно важное следствие, касающееся отличия бозе-частиц от ферми-частиц. Речь идет об интерференции амплитуд волновых функций, а также знаке, с которым происходит это явление. Явление интерференции весьма наглядно демонстрируется на хорошо известных опытах с прохождением потока фотонов через две узкие щели или потока электронов, рассеиваемых на решетке кристалла. Действительно, результаты этих опытов вскрыли принципиальное отличие квантовых частиц от классических.

Для того чтобы показать это, рассмотрим два опыта: один с классическими частицами и другой — с квантовыми частицами. В качестве классических частиц возьмем однородный поток летящих пуль, на пути которых стоит броневая плита с двумя отверстиями. За плитой устанавливается мишень, на которой можно наблюдать картину рассеяния пуль в следующих трех случаях: а) открыто первое отверстие и закрыто второе; б) открыто второе и закрыто первое; в) открыты оба отверстия. При достаточно большом количестве выпущенных пуль в каждом из этих случаев на мишени образуются следы, по которым можно судить о количестве пуль, попавших в то или иное место мишени, а по этим данным — построить кривые распределения вероятности попаданий.

Если через W_1 мы обозначим вероятность для случая а, а через w_2 — для случая б, то результирующая вероятность, отвечающая случаю в, будет равна:

$$W_{12} = W_1 + W_2,$$

т. е. вероятности для классических частиц складываются. Существенно иной получается картина для квантовых частиц. Вероятность попадания, например, электронов

в ту или иную точку сцинтиллирующего экрана будет определяться квадратом амплитуд волновой функции, т. е.

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi,$$

где

$$\Psi^* = \psi^* e^{i\omega t}; \quad \Psi = \psi e^{-i\omega t}.$$

Таким образом, если открыта одна щель, например первая, то амплитуда волновой функции (волны вероятности) будет равна $\psi_1 e^{-i\omega t}$, а интенсивность ее, определяющая плотность вероятности распределения вспышек на экране — $|\psi_1|^2$.

Если открыта только вторая щель, то аналогичным образом получим для указанных величин соответственно $\psi_2 e^{-i\omega t}$ и $|\psi_2|^2$. Наконец, когда открыты обе щели, результирующие амплитуды становятся равными $(\psi_1 + \psi_2) e^{-i\omega t}$, а соответствующая им плотность вероятности

$$|\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2\text{Re}[\psi_1 \psi_2^*].$$

Сравнивая оба результата, легко установить принципиальное различие между ними, заключающееся в появлении в последнем случае в выражении для результирующей вероятности интерференционного члена $2\text{Re}[\psi_1 \psi_2^*]$. Отсюда следует, что при сложении вероятностей в случае квантовых частиц действует особый закон, не совпадающий с аналогичным законом для классических частиц и обязанный проявлению микрочастицами волновых свойств.

Как известно, уравнение Шредингера относится к классу линейных уравнений, поэтому для его решений (т. е. для волновых функций) справедлив принцип суперпозиции. Поскольку волновые функции при перестановке аргументов относятся к одному и тому же состоянию объекта, то все получаемые при этом решения образуют, как об этом уже упоминалось ранее, вырожденную совокупность. Такое вырождение называется обменным. Складывая волновые функции, мы получим различные линейные их комбинации.

Суммирование же функций приводит с физической точки зрения к явлению интерференции, что может быть подтверждено опытным путем. Однако интерференция бозе-частиц и ферми-частиц в отношении фазы волн

происходит существенно различным образом, вытекающим из различия спинов и симметрии волновых функций частиц. Бозе-частицы являются во всех отношениях тождественными, т. е. абсолютно неразличимыми друг от друга частицами. Поэтому амплитуды их волновых функций ψ_1 и ψ_2 , являющиеся симметричными функциями, интерферируют с положительным знаком, т. е. их результирующая амплитуда будет равна:

$$\psi_s = \psi_1 + \psi_2.$$

Под результирующей или полной амплитудой следует понимать амплитуду того, что одновременно первая частица находится в состоянии ψ_1 , а вторая — в состоянии ψ_2 или (поскольку они неразличимы), наоборот, первая частица находится в состоянии ψ_2 , а вторая частица — в состоянии ψ_1 .

Две ферми-частицы являются неразличимыми лишь в том случае, если обе они обладают спинами с одинаковым по отношению друг к другу направлением (т. е. оба спина либо параллельны, либо антипараллельны друг другу). В этом случае амплитуды волновых функций, являющихся асимметричными функциями, складываются в противофазе и результирующая амплитуда будет равна:

$$\psi_a = \psi_1 - \psi_2.$$

В обоих случаях полные вероятности будут определяться двумя величинами: для бозе-частиц $|\psi_1 + \psi_2|^2$ и для ферми-частиц $|\psi_1 - \psi_2|^2$. Если же у двух ферми-частиц спины противоположны, то частицы становятся различимыми, явление интерференции их амплитуд исчезает и полная вероятность становится равной $|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$.

Отсюда следует весьма важные выводы. В тех случаях, когда складываются лишь вероятности, т. е. квадраты модулей волновых функций, их фазовые множители не играют никакой роли. В тех же случаях, когда, прежде чем вычислить вероятность, необходимо сложить амплитуды, фазовые множители, наоборот, играют весьма существенную роль в определении результирующей амплитуды, модуль квадрата которой равен полной вероятности.

Принцип Паули. Из приведенных выше свойств ферми-частиц вытекает одно следствие, имеющее значение фундаментального закона природы, а именно принцип

исключения (принцип Паули), который гласит: в каждом состоянии, определяемом полным набором четырех квантовых чисел, не может быть больше одного электрона.

Этот принцип весьма наглядно выражен в самой формуле для полной амплитуды двух ферми-частиц:

$$\psi_a = \psi_1 - \psi_2.$$

Действительно, если $\psi_2 = \psi_1$, то $\psi_a = 0$. Этот результат говорит о том, что пребывание двух ферми-частиц данной квантовой системы в одном и том же состоянии невозможно (исключается). Такое свойство может быть уподоблено своего рода поляризации, так как оно приводит к тому же эффекту, что и взаимодействие двух электрических зарядов одного знака, а именно к взаимному отталкиванию. Очевидно, что это свойство остается справедливым для ансамбля с любым числом ферми-частиц.

Прямо противоположным свойством обладают бозе-частицы. Последние, наоборот, проявляют тенденцию пребывать в одном и том же состоянии, причем эта тенденция тем сильнее, чем больше частиц уже находится в данном состоянии. Это легко подтвердить хотя бы на примере двух частиц. Так как две ферми-частицы с антипараллельными спинами отличны друг от друга, то вероятность их нахождения в одном и том же состоянии равна $2|\psi_a|^2$, в то время как для двух неразличимых бозе-частиц эта вероятность (при $\psi_2 = \psi_1$) равна $4|\psi_s|^2$, т. е. в 2 раза больше. Очевидно, что эта вероятность существенно возрастает с увеличением числа частиц, уже находящихся в том же состоянии. В частности, это свойство проявляется в индуцированном излучении, вероятность которого пропорциональна плотности энергии поля (иными словами, пропорциональна числу фотонов) той же частоты, что и частота индуцированного излучения.

2-9. ОПЕРАТОРЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Собственные функции и собственные значения оператора. Состояние системы описывается, как об этом уже сказано выше, волновой функцией ψ (называемой также функцией состояния) или матрицей плотности (см. далее).

Если речь идет не об измерении системы, т. е. не об экспериментальном ее исследовании, а о математическом решении задачи, то, образно выражаясь, роль измерительного прибора выполняет оператор, устанавливающий, как известно, соответствие между функциями. Это соответствие с физической точки зрения выражается в наличии такого набора действительных чисел, которые представляют собой средние значения физически наблюдаемых величин. В дальнейшем мы будем обозначать оператор большой буквой со значком \wedge сверху (например \hat{L}). В силу специфичности квантовых процессов, существенно отличающей их от классических, роль операторов здесь также приобретает весьма своеобразный характер. Рассмотрим этот вопрос несколько подробнее.

В результате действия оператора на некоторую функцию будет получена в общем случае новая функция:

$$\hat{L}\psi = \varphi.$$

Допустим, что φ является той самой функцией, над которой произведена операция, но умноженной на некоторое постоянное число L , т. е.

$$\hat{L}\psi = L\psi.$$

Такие функции называются собственными функциями оператора \hat{L} , а все возможные значения чисел L , соответствующие собственным функциям, называются собственными значениями этого оператора. Совокупность всех собственных значений оператора образует так называемый спектр, который может быть дискретным, сплошным или смешанным. Обычно в случае дискретного спектра собственные функции и собственные значения нумеруют и пишут:

$$\hat{L}\psi_i = L_i\psi_i.$$

Целые числа i (индексы), определяющие собственные функции и собственные значения, являются квантовыми числами. Если при каждом отдельном измерении получается один и тот же результат, то это соответствует случаю, когда состояние системы определяется одной

из ее собственных функций ψ_i , а среднее значение $\langle L \rangle$ измеряемой величины равно единственно возможному (с вероятностью единица) значению L_i .

Для того чтобы в этом убедиться, рассмотрим следующий пример. Возьмем операторное уравнение для собственной функции

$$\hat{L}\psi_i = L_i\psi_i$$

умножим обе части его на комплексно сопряженную функцию и проинтегрируем по всему конфигурационному пространству V , тогда

$$\int_V \psi_i^* \hat{L}\psi_i dV = L_i \int_V \psi_i^* \psi_i dV.$$

Но $\psi_i^* \psi_i dV = |\psi_i|^2 dV$ есть вероятность нахождения частицы (или всей системы в целом) в элементарном объеме пространства dV , а интеграл

$$\int_V \psi_i^* \psi_i dV = 1$$

является вероятностью нахождения частицы в любом элементарном объеме всего пространства, по которому производится интегрирование, т. е. достоверным событием. Поэтому по аналогии с выражением для математического ожидания можно написать для среднего значения величины L :

$$\langle L \rangle = \int_V \psi_i^* \hat{L}\psi_i dV = L_i.$$

Следовательно, если состояние системы описывается функцией ψ_i , являющейся собственной функцией оператора \hat{L} , т. е.

$$\hat{L}\psi_i = L_i\psi_i,$$

то среднее значение наблюдаемой величины совпадает с ее единственным собственным значением.

В более общем случае, когда состояние системы описывается произвольной, но вполне определенной для всех частиц волновой функцией и когда в результате каждого измерения получаются различные значения,

можно говорить лишь о вероятности их появления, причем вероятность того, что данная величина имеет одно из ее возможных собственных значений, равна квадрату модуля коэффициента разложения соответствующей собственной функции, т. е. $|c_i|^2$. Коэффициенты c_i являются функциями собственных значений оператора и представляют собой не что иное, как волновые функции в так называемом собственном представлении (подробнее об этом — см. § 2-15).

Эрмитовские операторы. Из чисто физических соображений, которые станут ясными из дальнейшего изложения, используется особый класс операторов, называемых линейными самосопряженными (или, иначе, эрмитовскими) операторами. Линейные операторы должны удовлетворять следующим условиям:

$$\widehat{L}(\psi_1 + \psi_2) = \widehat{L}\psi_1 + \widehat{L}\psi_2;$$

$$\widehat{L}(k\psi) = k\widehat{L}\psi,$$

где k — постоянная.

Отсюда как следствие вытекает, что линейная комбинация частных решений уравнений, содержащих линейные операторы, также является их решением. Оператор называется линейным самосопряженным оператором в том случае, если он удовлетворяет условию

$$\int_V \psi^* \widehat{L}\varphi dV = \int_V \varphi \widehat{L}^* \psi^* dV.$$

Здесь интегрирование производится по всему конфигурационному пространству V , а через \widehat{L}^* и φ^* обозначены комплексно сопряженные величины, соответствующие \widehat{L} и φ . Условие самосопряженности (эрмитовости) операторов может быть обосновано, исходя из следующих соображений. Интересующие нас средние значения физически наблюдаемых величин, очевидно, должны быть действительными величинами. Поэтому любая величина $\langle L \rangle$ должна быть равна своему сопряженному значению, т. е.

$$\langle L \rangle = \langle L \rangle^*.$$

Так как

$$\langle L \rangle = \int_V \psi^* \hat{L} \psi \, dV$$

и

$$\langle L \rangle^* = \int_V \psi \hat{L}^* \psi^* \, dV,$$

следовательно, оператор \hat{L} должен удовлетворять написанному ранее условию, а именно:

$$\int_V \psi^* \hat{L} \psi \, dV = \int_V \psi \hat{L}^* \psi^* \, dV.$$

Коммутативность операторов и одновременная измеримость физических величин. В общем случае операторы являются некоммутирующими, т. е. такими, для которых порядок производства операций над функцией не безразличен. Математически это выражается в том, что наряду с операторами обычного умножения используются, например, дифференциальные операторы. Некоммутативность таких операторов можно проиллюстрировать простым примером.

Предположим, что даны два оператора такого вида:

$$\hat{L} = x; \quad \hat{M} = \frac{d}{dx}.$$

Тогда

$$\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} \neq 0.$$

Действительно, легко проверить, что

$$\left(x \frac{d}{dx}\right) \psi - \frac{d}{dx} (x\psi) \neq 0.$$

Со свойством коммутативности операторов непосредственно связан вопрос о возможности одновременного измерения различных физических величин.

Представим себе, что состояние системы описывается некоторой волновой функцией ψ_i , являющейся одновременно собственной функцией двух различных операторов, т. е.

$$L\psi_i = L_i\psi_i;$$

$$\hat{M}\psi_i = M_i\psi_i.$$

Умножая обе части первого уравнения на \hat{M} , а второго — на \hat{L} и вычитая одно из другого, получаем:

$$(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M})\psi_i = 0.$$

Таким образом, если волновая функция ψ_i является собственной функцией, которая одновременно отвечает двум различным собственным значениям оператора, то такие операторы коммутируют и, следовательно, коммутативность операторов является критерием совместных измерений, т. е. таких, которые можно производить одновременно с любыми и независимыми друг от друга точностями. В противном случае, т. е. когда операторы \hat{L} и \hat{M} не коммутируют, они характеризуют несовместимые измерения, и если все-таки они проводятся одновременно, то точность одного из них будет зависеть от точности другого и наоборот. Очевидно, что это свойство является прямым следствием соотношения неопределенностей.

Операторы импульса и координаты. Операторы наблюдаемых величин обычно устанавливаются либо экспериментально, либо путем сопоставления их соответствующим коэффициентам в волновых уравнениях. Проиллюстрируем этот последний метод на простом примере. Ранее мы уже пользовались решением для волновой функции в виде

$$\Psi(x, t) = e^{i\left(\frac{p_x x}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)}.$$

Беря первую производную по x , получим:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p_x \Psi.$$

Дирак предложил рассматривать это уравнение как операторное, сопоставляя оператор $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ проекции импульса p на ось x . Очевидно, что можно таким же путем получить соответствие для двух других проекций p_y и p_z , т. е.

$$\hat{p}_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; \quad \hat{p}_y \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}; \quad \hat{p}_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$$

Исходя из такого сопоставления, можно утверждать, что в данном случае ψ является собственной функцией, а p_x, p_y, p_z — собственными значениями операторов соответственно

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}; -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$$

В качестве оператора координаты \hat{x} Шредингер выбрал оператор обычного умножения x , т. е.

$$\hat{x} \rightarrow x.$$

Перестановочные соотношения. Легко показать, что операторы \hat{p}_x и x (а также пары $\hat{p}_y; y; \hat{p}_z, z$) являются некоммутирующими. Действительно, легко проверить, что

$$\hat{p}_x x - x \hat{p}_x = -i\hbar.$$

Это соотношение, справедливое и для других составляющих импульса и координат, известно под названием перестановочного соотношения Гейзенберга. Физический смысл его заключается в том, что указанные выше величины, являющиеся сопряженными в смысле аналитической механики (произведение которых имеет размерность действия), одновременно точно неизмеримы.

Оператор энергии (гамильтониан). Исходя из полученных результатов, можно установить следующие соответствия:

$$-\frac{\hbar^2}{\partial x^2} \rightarrow p_x^2; \quad -\frac{\hbar^2}{\partial y^2} \rightarrow p_y^2; \quad -\frac{\hbar^2}{\partial z^2} \rightarrow p_z^2.$$

Так как кинетическая энергия

$$T = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2),$$

а потенциал является лишь функцией координат:

$$U = U(x, y, z),$$

то, пользуясь установленными выше соответствиями, можно найти оператор полной энергии (гамильтониан),

обычно обозначаемый через \hat{H} :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U.$$

Используя это обозначение, можно записать стационарное уравнение Шредингера в виде

$$\hat{H}\psi = E\psi.$$

Оператор четности. В предыдущей главе при рассмотрении вопроса о перестановке местами любой пары частиц данного ансамбля мы пришли к выводу о симметрии волновых функций. Исходя из этих свойств, можно сделать заключение о том, что симметричные и асимметричные волновые функции являются собственными функциями некоторого оператора \hat{P} , называемого оператором четности.

Таким образом, для случая, например, двух одинаковых частиц будет справедливо следующее операторное уравнение:

$$\hat{P}\psi(1,2) = P\psi(1,2).$$

Если на левую часть этого уравнения еще раз подействовать тем же самым оператором \hat{P} , то получим следующее равенство:

$$\hat{P}^2\psi(1,2) = P^2\psi(1,2).$$

С другой стороны, в силу тождественности частиц можно записать:

$$\hat{P}\psi(1,2) = \psi(2,1);$$

$$\hat{P}^2\psi(1,2) = \psi(1,2).$$

Сравнивая полученные в обоих случаях результаты, находим, что

$$P^2 = 1 \text{ и } P = \pm 1.$$

Очевидно, что собственная функция $\psi(1,2)$, отвечающая собственному значению $P = +1$, является симметричной функцией $\psi_s(1,2)$, а отвечающая собственному значению $P = -1$ — асимметричной функцией $\psi_a(1,2)$.

Из свойства неразличимости частиц вытекает важное следствие, связанное с законом сохранения четности частиц. Поскольку частицы неразличимы друг от друга, оператор Гамильтона не изменится при перестановке любой пары частиц. На математиче-

ском языке это означает, что оператор чистности \hat{P} коммутирует с оператором Гамильтона, т. е.

$$\hat{P}\hat{H} - \hat{H}\hat{P} = 0.$$

Отсюда следует, что собственные значения оператора являются интегралами движения частиц.

2-10. ОПЕРАТОР МОМЕНТА КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ

Операторы проекций момента. Для характеристики движения электрона в атоме под влиянием центральных сил важна такая величина, как момент импульса или, иначе, момент количества движения.

Согласно классической механике этот момент равен:

$$\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{p},$$

где \mathbf{r} — радиус-вектор;

\mathbf{p} — вектор импульса.

Составляющие момента в декартовых координатах будут иметь вид:

$$M_x = yp_z - zp_y; \quad M_y = zp_x - xp_z; \quad M_z = xp_y - yp_x.$$

Так как операторы $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ нам известны, то можно написать для составляющих оператора \hat{M} следующие выражения:

$$\begin{aligned} \hat{M}_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right); \quad \hat{M}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right); \\ \hat{M}_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned}$$

Не производя промежуточных выкладок, напомним перестановочные соотношения Гейзенберга для операторов и составляющих моментов импульса (они могут быть получены из приведенных выше выражений для составляющих моментов):

$$\hat{M}_x \hat{M}_y - \hat{M}_y \hat{M}_x = i\hbar \hat{M}_z \text{ и т. д.}$$

Так как $\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2$, то можно показать, что

$$\hat{M}^2 \hat{M}_x - \hat{M}_x \hat{M}^2 = 0 \text{ и т. д.,}$$

Этот результат говорит о том, что величины M^2 и каждая в отдельности из величин M_x , M_y , M_z одновременно измеримы, в то время как одновременное измерение M_x , M_y , M_z невозможно.

Магнитное квантовое число. Запишем для z -й составляющей оператора \hat{M} операторное уравнение

$$\hat{M}_z \psi = M_z \psi, \quad (2-7)$$

где M_z — собственные значения оператора \hat{M}_z .

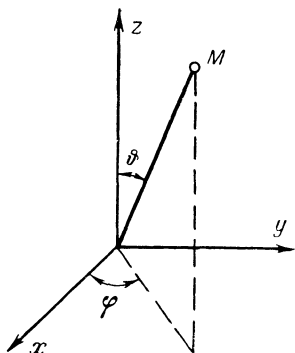


Рис. 2-8. Связь между декартовой и сферической системами координат.

Учитывая полученное выше выражение для \hat{M}_z , перепишем:

$$-i\hbar \left(x \frac{\partial \psi}{\partial y} - y \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = M_z \psi.$$

Решение этого уравнения проводится обычно в сферических координатах (рис. 2-8) r , θ , φ . Напомним:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi; \quad y = r \sin \theta \sin \varphi; \quad z = r \cos \theta.$$

Из этих соотношений следует, что

$$x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Поэтому уравнение (2-7) можно переписать в виде

$$\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \frac{i}{\hbar} M_z \psi,$$

откуда

$$\psi = A e^{\frac{i}{h} M_z \varphi}.$$

Поскольку

$$e^{\frac{i}{h} M_z \varphi} = \cos \frac{M_z}{h} \varphi + i \sin \frac{M_z}{h} \varphi,$$

то следует, что M_z/h должно быть целым числом. Обозначим его через m_l . Тогда решение может быть записано в виде $\psi = A e^{i m_l \varphi}$, где $m_l = M_z/h$ — магнитное квантовое число, принимающее целые как положительные, так и отрицательные значения

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.$$

Орбитальное квантовое число. Другим важным для нас операторным уравнением является уравнение

$$\hat{M}^2 \psi = M^2 \psi.$$

Решение его (также в сферических координатах) дает для M^2 следующую величину:

$$M^2 = l(l+1)h^2; \quad l = 0, 1, 2, \dots,$$

откуда

$$M = \sqrt{l(l+1)}h.$$

Число l называют орбитальным квантовым числом.

2-11. КЛАССИЧЕСКОЕ ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ И УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Прежде чем переходить к рассмотрению типовых задач квантовой механики, сделаем одно весьма важное замечание, касающееся как самого уравнения Шредингера, так и физического истолкования получаемых при этом решений.

Мы отмечали известную аналогию, проводимую между геометрической оптикой и классической механикой. Эта аналогия послужила основанием де Бройлю установить подобную же аналогию между волновой оптикой и волновой механикой. В математическом отношении указанные аналогии являются достаточно полными. Что

же касается физической интерпретации получаемых в обоих случаях решений, то они существенно различны. Это станет ясным из следующих рассуждений.

Классическое волновое уравнение. Трехмерное волновое уравнение классической физики может быть записано в виде

$$\nabla^2 f - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = 0.$$

Для гармонических процессов подстановкой $f = ue^{-i\omega t}$ это уравнение приводится к следующему виду:

$$\nabla^2 u + k^2 u = 0,$$

где $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число.

В общем случае число k является функцией координат, т. е. $k = k(x, y, z)$.

Обозначим волновое число для вакуума через $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ и введем показатель преломления

$$n = \frac{k}{k_0} = \frac{\lambda_0}{\lambda}.$$

В результате волновое уравнение принимает следующий вид:

$$\nabla^2 u + k_0^2 n^2 u = 0, \quad (2-8)$$

а для вакуума

$$\nabla^2 u + k_0^2 u = 0. \quad (2-9)$$

Сопоставление с уравнением Шредингера. Обратимся теперь к трехмерному уравнению Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(x, y, z) \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}.$$

Подстановкой $\Psi = \psi e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$ оно сведется к уравнению для стационарного случая:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0. \quad (2-10)$$

В той области пространства, в которой потенциал отсутствует ($U=0$), уравнение (2-10) примет вид:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0. \quad (2-11)$$

Сопоставляя уравнений (2-8) и (2-9) соответственно с уравнениями (2-10) и (2-11), легко установить их полную математическую эквивалентность. Действительно, если положить

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U); \quad k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E; \quad n^2 = \frac{k^2}{k_0^2} = \frac{E - U}{E},$$

то уравнения (3-11) и (3-12) примут вид:

$$\nabla^2 \psi + k_0^2 n^2 \psi = 0;$$

$$\nabla^2 \psi + k_0^2 \psi = 0.$$

В уравнении Шредингера n_0 ($U=0$) характеризует «среду» (точнее, систему), коэффициент преломления которой может быть как меньше n , так и больше n , в зависимости от знака U . Кроме того, при положительных значениях U и $U > E$ коэффициент n становится мнимой величиной, и в этом случае будет наблюдаться эффект, соответствующий в классической электродинамике явлению полного отражения.

Из сопоставления уравнений следует, что если отвлечься от конкретного содержания описываемого ими процесса, то результаты решения любого из этих уравнений всегда могут быть интерпретированы в терминах и понятиях классической теории электродинамики. Действительно, во всех без исключения случаях мы имеем дело с волновыми процессами, для которых типичны такие явления, как интерференция и дифракция, а также явления, происходящие на границе раздела двух сред. Однако сущность физических процессов, описываемых этими уравнениями, будет принципиально различна в зависимости от того, идет ли речь о классическом процессе или квантовом.

Классические волны и волновая функция. В классическом случае под величиной u понимают амплитуду поля, а под квадратом модуля этой функции — величину, пропорциональную энергии поля. Таким образом, обе величины u и $|u|^2$ следует отнести к категории «физически наблюдаемых» величин.

В квантовой же механике ни функция ψ , ни модуль ее квадрата $|\psi|^2$ не являются наблюдаемыми величинами.

ми, они приобретают здесь существенно иной смысл, хотя, повторяем, их поведение во времени и пространстве ничем не отличается от поведения классической волновой функции.

Так как уравнения Шредингера являются линейными и их решения подчиняются закону суперпозиции, имеет принципиально важное значение интерференция волн. И опять-таки «классическое поведение» волновой функции, поскольку она имеет в квантовой механике иной физический смысл, приводит к существенно иным результатам по сравнению с тем, что мы имеем в классической теории поля.

Если получаемые решения относятся к когерентным «волнам», то необходимо складывать сначала амплитуды, т. е.

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 + \dots + \psi_n,$$

а затем уже вычислять квадрат модуля этой суммарной величины, т. е.

$$\begin{aligned} \psi^* \psi &= (\psi_1^* + \psi_2^* + \dots + \psi_n^*) (\psi_1 + \psi_2 + \dots + \psi_n) = \\ &= |\psi_1 + \psi_2 + \dots + \psi_n|^2. \end{aligned}$$

Если же решения относятся к некогерентным волнам, то вопрос о фазах отпадает и величина $\psi^* \psi = |\psi|^2$ оказывается равной просто сумме квадратов модулей волновых функций

$$\psi^* \psi = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \dots + |\psi_n|^2.$$

Из комплексности решения уравнения Шредингера следует, что функция ψ , называемая амплитудой вероятности, непосредственно физического смысла не имеет. Такой смысл, и то своеобразный, приобретает лишь квадрат модуля этой величины. Известно, что величина $|\psi|^2 dv$ является вероятностью того, что частица находится в элементарном объеме dv некоторого конфигурационного пространства, т. е. пространства тех физически наблюдаемых и одновременно измеримых величин, которые являются аргументами данной волновой функции.

Неклассический характер волн, описываемых функциями ψ , особенно отчетливо выступает при рассмотрении систем многих частиц.

Для таких систем стационарное уравнение Шредингера приобретает следующий вид:

$$\frac{1}{m_1} \nabla_1^2 \psi + \frac{1}{m_2} \nabla_2^2 \psi + \dots + \frac{1}{m_n} \nabla_n^2 \psi + \\ + \frac{2}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0,$$

где m_1, m_2, \dots, m_n — массы частицы 1, 2, ..., n ;

$\nabla_1^2, \nabla_2^2, \dots, \nabla_n^2$ — операторы Лапласа, соответствующие частицам 1, 2, ..., n .

В данном случае

$$\psi = \psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n)$$

является функцией $3n$ координат. Таким образом, эта функция задана не в реальном трехмерном пространстве, а в абстрактном $3n$ -мерном пространстве, называемом также конфигурационным.

Естественно, что волны в таком пространстве лишены того физического смысла, какой имеют обычные волны классической физики.

Рассмотрим далее несколько типичных задач квантовой механики, из решения которых весьма явственно выступает, с одной стороны, их связь с теорией электромагнитного поля, а с другой — отличие квантовой механики от классической, в силу чего она получила название волновой механики.

2-12. ДВИЖЕНИЕ ЧАСТИЦЫ В НЕОГРАНИЧЕННОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Движение свободной частицы. Предположим, что мы имеем частицу, свободно движущуюся в пространстве в отсутствие силовых полей. Для упрощения задачи рассмотрим случай одномерного движения, т. е. движения частицы в направлении оси Ox ($-\infty \leq x < \infty$). В этом случае уравнение Шредингера для амплитуды может быть записано в виде

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k_0^2 \psi = 0,$$

где

$$k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar} = \frac{p^2}{\hbar^2}.$$

Решение этого уравнения известно:

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Полная волновая функция, очевидно, равна:

$$\Psi = \psi e^{-i\omega t} = Ae^{-i(\omega t - kx)} + Be^{-i(\omega t + kx)},$$

где

$$\omega = \frac{E}{\hbar}.$$

Таким образом, свободное движение частицы представляет собой в общем случае наложение двух плоских волн, движущихся в прямо противоположных друг другу направлениях.

Однако здесь возникает затруднение следующего характера. Найденная выше функция, являясь однозначной и непрерывной, не удовлетворяет условию квадратичной интегрируемости. Иными словами, интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dV$$

будет расходящимся, если A и B одновременно не равны нулю.

Таким образом, для того чтобы устранить эту трудность, необходимо обеспечить сходимости интеграла. Для этого прибегают обычно к так называемым периодическим граничным условиям.

Периодические граничные условия. Этот метод нормировки ψ -функцией, предложенный Борном, состоит в разложении поля в тройной ряд Фурье. Для этого делят мысленно все пространство на ряд соприкасающихся друг с другом кубиков с произвольным, но равным для всех них ребром L . Необходимым условием при этом является то, что в соответствующих точках противоположных граней каждого кубика поле должно иметь в каждый момент времени одно и то же значение:

$$\psi(x) = \psi(x + L).$$

Это условие, как видно, полностью совпадает с условием идеально отражающих стенок, так как и в том, и другом случае система обладает неизменным запасом энергии.

В соответствии с указанным выше условием и ограничиваясь лишь одной бегущей волной $\psi = Ae^{ikx}$, можно записать:

$$Ae^{ikx} = Ae^{ik(x+L)}.$$

Отсюда следует, что

$$k = k_n = \frac{2\pi n}{L}, \text{ где } n = \pm 1, \pm 2, \dots$$

Если мы рассматриваем лишь один кубик с конечным значением L , то для энергии получим ряд ее возможных значений. Действительно, поскольку

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

и

$$k^2 = k_n^2 = \frac{2\pi n}{L} = \frac{2mE_n}{\hbar^2},$$

то

$$E_n = \frac{2\pi^2 \hbar^2 n^2}{mL^2}.$$

Нормировка функций ψ_n (соответствующих собственным значениям k_n) может быть получена из следующего условия:

$$\int_{-L/2}^{+L/2} \psi^* \psi \, dV = 1.$$

Принимая во внимание, что $\psi = Ae^{ikhx}$, это условие дает для A значение

$$A = \frac{1}{\sqrt{L}}.$$

Следовательно, собственные функции примут вид:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i2\pi nx/L}.$$

Решение данной задачи дает отчетливое представление о корпускулярно-волновой природе свободно движущейся частицы. Действительно, поведение такой частицы, описываемое волновой функцией, сопоставляется с плоской гармонической волной. В одномерном случае эта частица представляет собой синусоидальную волну вдоль прямой x ($-\infty < x < \infty$). Величина квадрата модуля амплитуды волны является вероятностью нахождения частицы в той или иной точке бесконечной оси x . Очевидно, при $L \rightarrow \infty$ эта вероятность стремится к нулю, что следует из выражения

$$|\psi|_{L \rightarrow \infty}^2 = \frac{1}{L} \rightarrow 0.$$

При этом дискретный спектр значений E_n переходит в сплошной. Подчеркнем: энергия частицы, движущейся в неограниченном пространстве, не квантуется.

Прохождение частицы через потенциальную ступень. Ограничиваясь, так же как и в предыдущем случае, движением частицы в направлении оси x , рассмотрим следующую задачу.

На пути движения частицы в пространстве, лишенном потенциала, в точке $x=x_0$ происходит скачок потенциала от нуля до значения U (рис. 2-9) и частица далее продолжает свое движение в поле этого потенциала. С точки зрения классической волновой теории эту картину следует описывать таким образом. Плоская волна, движущаяся в среде с коэффициентом преломления n_1 при значении координаты $x=x_0$, попадает в однородную неограниченную среду с коэффициентом преломления n_2 (рис. 2-10). То, что

происходит с такой волной на границе раздела двух различных сред, хорошо известно: волна частично отразится от границы, а частично, преломившись, проникнет во вторую среду. Фазовая скорость ее и, следовательно, длина волны изменяются. При некоторых условиях может произойти явление полного отражения.

Посмотрим, к чему приведет решение этой задачи как квантово-механической.

Разобьем область $U(x)$ на две, описываемые двумя различными уравнениями (см. рис. 2-9):

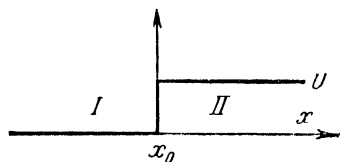


Рис. 2-9. Одномерная потенциальная ступень.

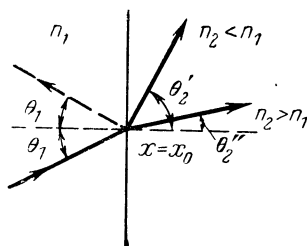


Рис. 2-10. Падение плоской волны на границу раздела двух сред.

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k_1 \psi_1 = 0$$

и

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + k_2 \psi_2 = 0,$$

где

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}; \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E-U)}.$$

Очевидно, решениями будут следующие выражения:

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x};$$

$$\psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}.$$

Для получения непрерывной кривой на границе областей I и II (рис. 2-9), т. е. в точке $x=x_0$, необходимо подобрать соответствующие коэффициенты A_1, B_1, A_2, B_2 . Они могут быть получены из условий непрерывности в точке $x=x_0$ функций $\psi(x)_{x=x_0}$ и их производных $(\partial\psi/\partial x)_{x=x_0}$:

$$\psi_1(x_0) = \psi_2(x_0);$$

$$\left(\frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right)_{x=x_0} = \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right)_{x=x_0}.$$

Это равносильно следующим двум равенствам:

$$A_1 e^{ik_1 x_0} + B_1 e^{-ik_1 x_0} = A_2 e^{ik_2 x_0} + B_2 e^{-ik_2 x_0};$$

$$k_1 A_1 e^{ik_1 x_0} - k_1 B_1 e^{-ik_1 x_0} = k_2 A_2 e^{ik_2 x_0} - k_2 B_2 e^{-ik_2 x_0}.$$

Могут представиться два случая:

$$E > U \text{ и } E < U.$$

Рассмотрим первый случай, так называемую «низкую ступень» ($E > U$) (рис. 2-11, а) и ее классический аналог (рис. 2-11, б). Имеем для области I:

$$k_1 = \frac{1}{h} \sqrt{2mE}$$

и для области II:

$$k_2 = \frac{1}{h} \sqrt{2m(E - U)}.$$

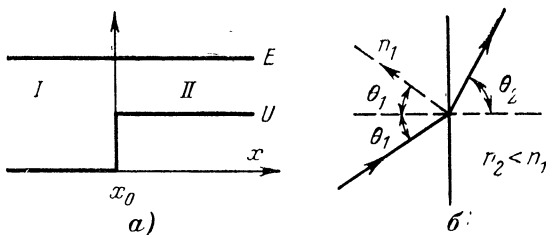


Рис. 2-11. Схема «низкой ступени».

В этом случае обе постоянные (k_1 и k_2) являются действительными числами. Решения для этих областей имеют вид:

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x};$$

$$\psi_2 = A_2 e^{ik_2 x}.$$

Поскольку обратных волн в области II нет, то $B_2 = 0$. Очевидно, что на границе раздела двух сред происходят явления отраже-

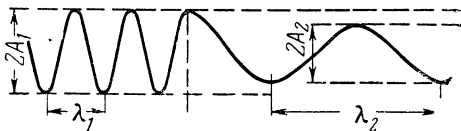


Рис. 2-12. Изменение длины дебройлевской волны при прохождении низкой ступени.

ния и преломления волн. После прохождения ступени волна, соответствующая частице, остается гармонической, но с большей длиной (рис. 2-12).

Для согласования решений на границе ($x = x_0$) необходимо использовать, как указано выше, два уравнения непрерывности, из которых следует:

$$A_1 + B_1 = A_2; \quad k_1 A_1 - k_1 B_1 = k_2 A_2.$$

Из этих двух уравнений можно найти коэффициент отражения (для энергии), равный

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2.$$

Простые расчеты для различных отношений E/U ($E/U=1$; 1,25; 2,0; ...) показывают, что коэффициент отражения остается отличным от нуля даже при значительном превышении энергии E над высотой ступени, что является следствием наличия у микро-частицы волновых свойств. Напомним, что с точки зрения классической механики при условии $E > U$ частица обязательно должна пройти через ступень.

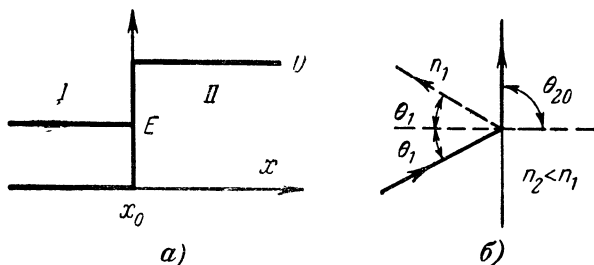


Рис. 2-13. Схема «высокой ступени».

Рассмотрим теперь случай «высокой ступени» ($E < U$, рис. 2-13,а) и классический аналог (рис. 2-13,б).

В этом случае

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE};$$

$$k_2 = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(U - E)} = ik.$$

Решениями являются:

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x};$$

$$\psi_2 = A_2 e^{-kx}.$$

Из этих решений видно, что после прохождения частицы во вторую среду волновой процесс исчезает и принимает вид затухающей экспоненты. В этом случае коэффициент отражения оказывается равным:

$$R = \left| \frac{k_1 - ik}{k_1 + ik} \right|^2 = 1.$$

Таким образом, на границе раздела двух областей, говоря языком классической физики, произошло явление полного отраже-

ния волны, которая, проникая в тонкий слой области II и по мере своего продвижения в ней, быстро затухает (рис. 2-14). В отличие от классического случая микрочастица благодаря своим волновым свойствам проникает в область II, и вероятность такого проникновения пропорциональна величине

$$|\psi_2|^2 = A_2^2 e^{-2\kappa x} = A_2^2 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)} x}.$$

Прохождение частицы через потенциальный барьер. Эта задача заключается в следующем. На пути движения частицы в пространстве, в котором $U_1=0$, в точке $x=x_1$ происходит скачок по-

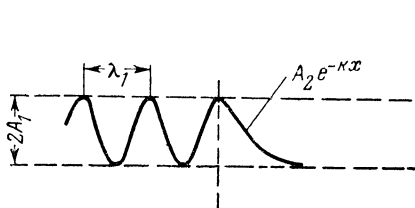


Рис. 2-14. Явление полного отражения дебройлевской волны.

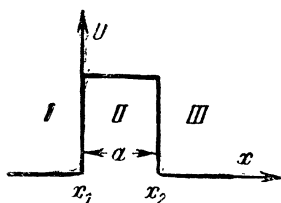


Рис. 2-15. Схема потенциального барьера.

тенциала до величины $U_2=U$. Это значение потенциала сохраняется до точки $x=x_2$, где она снова скачком падает до нуля $U_3=0$ (рис. 2-15). Таким образом, интересующую нас область можно разделить на три части:

$$(I) \quad x \leq 0; \quad U_1=0;$$

$$(II) \quad 0 \leq x \leq a; \quad U_2=U;$$

$$(III) \quad x \geq a, \quad U_3=0,$$

где $a=x_2-x_1$ — называется шириной потенциального барьера.

С классической точки зрения эта задача аналогична прохождению плоской волны через слоистую среду. Явления, которые при этом происходят в обоих случаях (и движение квантовой частицы и движение классической волны), будут ясны при решении этой задачи.

Рассмотрим сначала случай низкого барьера ($E > U$, рис. 2-16, а, б.)

Для областей I и II можно написать:

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}.$$

Для области II:

$$k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E-U)}.$$

Решение принимает вид:

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x};$$

$$\psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x};$$

$$\psi_3 = A_3 e^{ik_1 x}.$$

Условия непрерывности запишутся в виде следующих равенств:

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2; \quad k_1 A_1 - k_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2;$$

$$A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_1 a}.$$

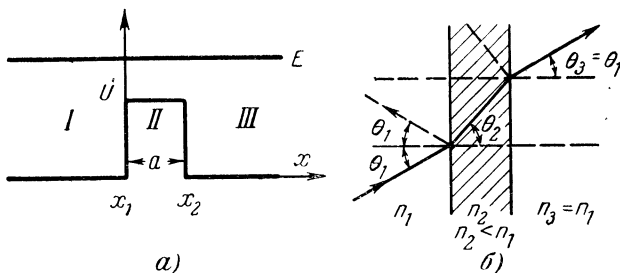


Рис. 2-16. Схема низкого барьера.

Из этих выражений легко получить отношение

$$\frac{B_1}{A_1} = \frac{i(k_2^2 - k_1^2)}{i(k_1^2 + k_2^2) + 2k_1 k_2 \operatorname{ctg} k_2 a},$$

откуда коэффициент отражения

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{B_1^* B_1}{A_1^* A_1} = \frac{(k_2^2 - k_1^2)^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2 + 4k_1^2 k_2^2 \operatorname{ctg}^2 k_2 a}.$$

Этот коэффициент принимает наибольшее значение при условии, когда

$$k_2 a = \frac{n\pi}{2},$$

и он обращается в нуль при $k_2 a = n\pi$, где $n = 1, 2, \dots$

Случай высокого барьера ($E < U$, рис. 2-17). Для области I и III имеем:

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE},$$

а для области II:

$$k_2 = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)} = ik.$$

Соответствующие решения примут вид:

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x};$$

$$\psi_2 = A_2 e^{-kx} + B_2 e^{kx};$$

$$\psi_3 = A_3 e^{ik_1 x}.$$

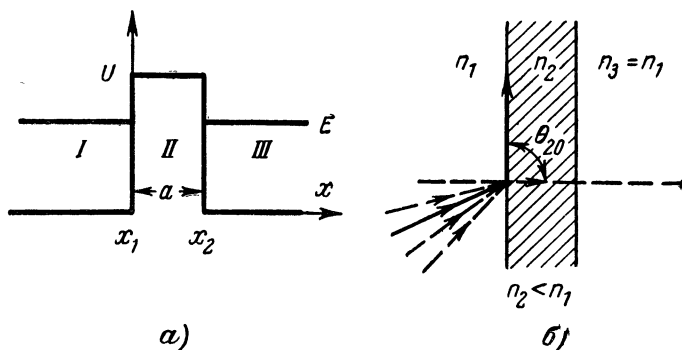


Рис. 2-17. Схема высокого барьера.

Условие непрерывности удовлетворяется следующими равенствами

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2; ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = -kA_2 + kB_2;$$

$$A_2 e^{-ka} + B_2 e^{ka} = A_3 e^{ik_1 a};$$

$$-kA_2 e^{-ka} + kB_2 e^{ka} = ik_1 A_3 e^{ik_1 a}.$$

Решение этой системы дает:

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{2ik_1 k e^{ik_1 a}}{(k_1^2 - k^2) \operatorname{sh} ka + 2ik_1 k \operatorname{ch} ka}.$$

Для коэффициента прохождения имеем:

$$T = \frac{A_3^* A_3}{A_1^* A_1} = \frac{4k_1^2 k^2}{(k_1^2 - k^2)^2 \operatorname{sh}^2 ka + 4k_1^2 k^2 \operatorname{ch}^2 ka}.$$

Если положить $k_1 \approx k$, то выражение для T упрощается и принимает вид:

$$T \approx 4e^{-2ka} = 4e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)} a}.$$

Из этого выражения видно, что оно совпадает с тем, которое мы имели для вероятности проникновения частицы в пограничную область при прохождении потенциальной ступени в том случае, когда $E < U$.

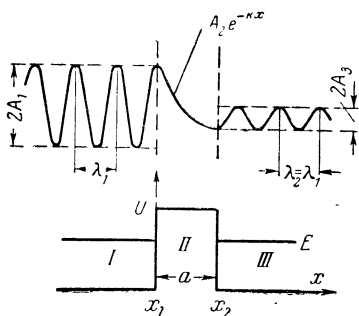


Рис. 2-18. Туннельный эффект.

Из рассмотрения данного примера видно, что частица может преодолеть барьер даже в том случае, когда ее энергия E меньше высоты барьера U . После прохождения барьера энергия и длина волны частицы оказываются точно такими же, какими они были до прохождения барьера (рис. 2-18).

Эффект такого прохождения через барьер при условии, что $E < U$, называется гуннельным эффектом и является чисто квантовым явлением, связанным с волновыми свойствами частицы.

2-13. ДВИЖЕНИЕ ЧАСТИЦЫ В ОГРАНИЧЕННОЙ ОБЛАСТИ ПРОСТРАНСТВА

Частица в прямоугольной потенциальной яме. Эта задача представляет большой интерес, так как потенциальная яма является первым приближением к модели того силового поля, которое связывает электроны в атоме или атомы в кристаллической решетке.

Потенциальная яма характеризуется двумя основными параметрами: глубиной U и шириной a (рис. 2-19). Эти два параметра являются достаточными для описания движения частицы в яме. Обычно средние значения этих величин удается определить экспериментально. Так как точные контуры ямы, вообще говоря, сложны, то обычно реальную модель заменяют эквивалентной, имеющей вид прямоугольной ямы со средними значениями указанных выше параметров.

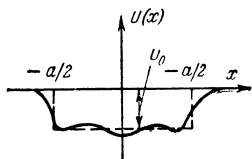


Рис. 2-19. Схема потенциальной ямы.

Различают два случая: частица над ямой ($E > U$) (рис. 2-20,а) и частица в яме ($E < U$) (рис. 2-20,б). В первом случае поведение частицы такое же, как и свободной частицы, но с тем лишь различием, что при прохождении ямы ее движение вначале «ускоряется», а затем «замедляется», что связано с изменением длины дебройлевской волны. Чем меньше энергия частицы, тем возмущение ее полем ямы больше.

Во втором случае частица захватывается ямой и в ней удерживается. Характер ее движения при этом по сравнению со свободной частицей существенно изменяется. Прежде всего оно становится периодическим. Периодичность же движения приводит к появлению условия квантования значений энергии частицы.

В качестве примеров рассмотрим два частных случая, а именно одномерную и трехмерную потенциальные ямы с бесконечно высокими стенками, т. е. когда внутри ямы $U(y)=0$, а вне ее $U \rightarrow \infty$. Эти оба случая в переводе на язык классической волновой теории являются не чем иным, как свободными колебаниями соответственно в короткозамкнутом отрезке идеальной линии и в прямоугольном объемном резонаторе с идеально проводящими стенками.

Случай одномерной ямы. Разобьем все пространство на три

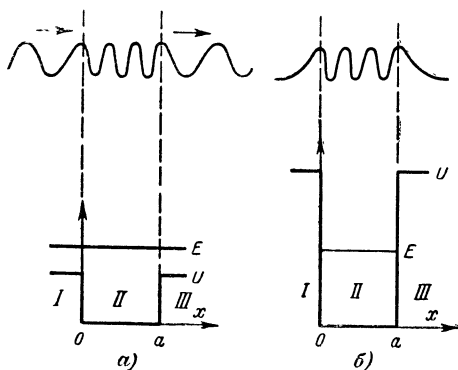


Рис. 2-20. Частица над ямой ($E > U$) и частица в яме ($E < U$).

области (см. рис. 2-20). По условию задачи в областях I и III $U_1=U_3 \rightarrow \infty$ и $\psi_1=\psi_3=0$. Что касается области II, то для нее

$$U_2=0 \text{ и } \psi_2=\psi_n=A_n e^{ik_n x} + B_n e^{-ik_n x},$$

где

$$k_n^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_n.$$

Граничными условиями для функции ψ_n будут:

$$\psi_n=0 \text{ при } x=0 \text{ и } x=a.$$

Используя эти условия, получаем:

$$A_n = -B_n; e^{ik_n a} - e^{-ik_n a} = 0.$$

Последнее равенство эквивалентно условию

$$\sin k_n a = 0,$$

откуда

$$k_n = \frac{n\pi}{a}.$$

Таким образом, мы приходим к следующему выражению для определения дискретного спектра энергии частицы:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2},$$

где $n = 1, 2 \dots$

Этим значениям энергии соответствуют волновые функции

$$\psi_n = A_n \sin \frac{n\pi}{a} x.$$

Коэффициент A_n может быть найден из условия нормировки:

$$\int_0^a \psi_n^2 dx = \int_0^a A_n^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = A_n^2 \frac{a}{2} = 1,$$

откуда

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

и

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x.$$

На рис. 2-21 изображены уровни энергии частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, а также значения собственных функций ψ_n . Является характерным, что расстояние между уровнями увеличивается пропорционально n^2 . Следует отметить, что случай $n=0$, исходя из выражения для ψ_n , исключается. Фи-

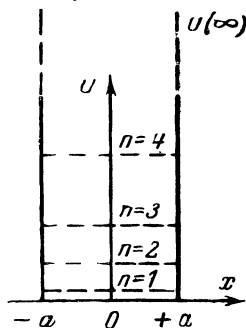


Рис. 2-21. Энергетические уровни частицы, находящейся в потенциальной яме с бесконечно глубокими стенками.

зически это означает, что наименьшая энергия частицы в одномерной яме отлична от нуля (что соответствует $n=1$). Это объясняется тем, что при $n=0$ полная энергия частицы E обращается в нуль. Однако это противоречит соотношению неопределенностей, поскольку отсутствие движения означает равенство нулю импульса частицы и, следовательно, фиксированное значение ее координаты, т. е. точные значения канонически сопряженных величин, что невозможно.

Случай трехмерной ямы. Для решения задачи о движении частицы в трехмерной яме, называемой также «потенциальным ящиком», мы можем воспользоваться результатами, полученными при рассмотрении одномерной ямы. Имея в виду, что потенциальный ящик с математической точки зрения полностью совпадает со случаем объемного резонатора, будем искать реше-

ние по методу разделения переменных, т. е. положим:

$$\psi_{n_x, n_y, n_z} = \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z),$$

где $\psi_{n_x}(x)$, $\psi_{n_y}(y)$, $\psi_{n_z}(z)$ — волновые функции, определяющие движение частицы в ящике по трем взаимно перпендикулярным направлениям. Поскольку решение для одномерной ямы нам известно, то можно сразу же написать решение для данного случая в следующем виде:

$$\psi(x, y, z) = A \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z),$$

где

$$k_x = \frac{n_x \pi}{a}; \quad k_y = \frac{n_y \pi}{b}; \quad k_z = \frac{n_z \pi}{c}$$

и a , b , c — длины сторон ящика по осям x , y , z соответственно.

Поскольку

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_{n_x, n_y, n_z},$$

то энергетический спектр собственных значений определится из выражения

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right).$$

В качестве иллюстрации комбинированного случая, когда частица может находиться в двух соседних потенциальных ямах, разделенных потенциальным барьером, может служить молекула аммиака NH_3 . Эта молекула уже фигурировала в нашем изложении при рассмотрении молекулярного генератора (см. § 6, гл. 2). Напомним, что молекула может иметь два устойчивых зеркально-симметричных энергетических состояния, соответствующих минимуму потенциальной энергии (рис. 2-22). Переход из одной ямы в другую возможен. Этот процесс вероятностный и может быть объяснен лишь на основе квантовой механики как туннельный эффект. Явление такого перехода носит колебательный характер и называется инверсией. Мы уже указывали на то, что такое поведение частицы приводит к расщеплению спектральных линий (уровней). В частности, для молекулы аммиака интервал между расщепленными уровнями для наиболее интенсивной линии равен приблизительно 1,27 см.

Жесткий ротатор. Жестким ротатором в квантовой механике называется система, состоящая из двух частиц, расстояние между которыми при движении системы сохраняется постоянным (рис. 2-23). Примером такой системы может служить идеализированная модель двухатомной молекулы, в которой расстояние между атомами сохраняется неизменным. Обычно при решении данной задачи вводят понятие момента инерции, равного в данном случае

$$I_0 = \frac{\mu_1 \mu_2}{\mu_1 + \mu_2} r^2 = \mu r^2,$$

где μ_1 и μ_2 — массы частиц;

μ — приведенная масса системы;

r — расстояние между центрами масс частиц.

В этой задаче потенциальную энергию полагают равной нулю ($U=0$).

Введем более удобные для данного случая сферические координаты, которые связаны с декартовыми следующей зависимостью:
 $x=r \sin \vartheta \cos \varphi$; $y=r \sin \vartheta \sin \varphi$; $z=r \cos \vartheta$.

Оператор Лапласа в этой системе имеет, как известно, следующий вид:

$$\nabla^2(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

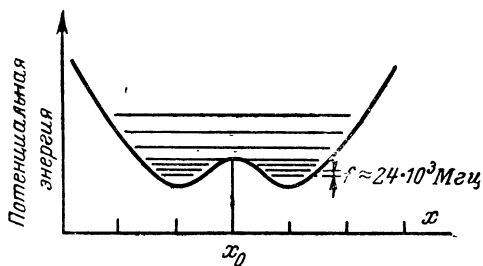


Рис. 2-22. Энергетические уровни молекулы аммиака

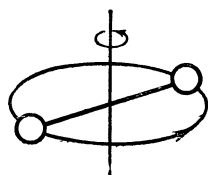


Рис. 2-23. Схема жесткого ротатора.

Так как в данном случае $r=\text{const}$, то $\partial/\partial r \equiv 0$, поэтому уравнение Шредингера примет вид:

$$\left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{2I_0}{\hbar^2} E \right] \Phi = 0. \quad (2-12)$$

Решение проводится обычным методом разделения переменных:

$$\psi(\vartheta, \varphi) = \theta(\vartheta) \Phi(\varphi).$$

Подставляя это решение в уравнение (2-12) и деля обе его части на $\theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$, получаем два независимых уравнения:

$$\frac{\sin \vartheta d}{\vartheta d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\vartheta}{d\vartheta} \right) + \frac{2I_0 E}{\hbar^2} \sin^2 \vartheta = m^2; \quad (2-13)$$

$$-\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = m^2,$$

где m^2 — постоянная разделения.

Решение второго уравнения (2-13) дает для азимутальной функции следующее выражение:

$$\Phi = e^{im\varphi}.$$

Это решение непрерывно и конечно. Для того чтобы оно было и однозначно, необходимо положить m целым числом ($m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Число m является не чем иным, как магнитным квантовым числом, которое мы обозначали через m_l .

Первое уравнение (2-13) может быть переписано в виде

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\theta}{d\vartheta} \right) + \left(\beta - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right) \theta = 0, \quad (2-14)$$

где

$$\beta = \frac{2I_0 E}{h^2}.$$

Введем новую переменную:

$$x = \cos \vartheta; \quad dx = -\sin \vartheta d\vartheta,$$

тогда уравнение (2-13) примет вид:

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{d\theta}{dx} \right] + \left(\beta - \frac{m^2}{1-x^2} \right) \theta = 0.$$

Произведя дифференцирование первого члена данного уравнения и разделив затем обе части его на $(1-x^2)$, получим:

$$\frac{d^2\theta}{dx^2} - \frac{2x}{1-x^2} \frac{d\theta}{dx} + \left(\frac{\beta}{1-x^2} - \frac{m^2}{(1-x^2)^2} \right) \theta = 0.$$

Решение для функции θ ищут в виде

$$\theta = (1-x^2)^{m/2} v, \quad (2-15)$$

где v — некоторый алгебраический полином.

Отметим, что функции θ , обозначаемые через $\theta_l^m(x)$ или $P_l^m(x)$, называются присоединенными функциями Лежандра. Они имеют следующее выражение:

$$\theta_l^m(x) = P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x),$$

где

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l.$$

Подставляя решение (2-15) в уравнение (2-14), приходим к следующему уравнению:

$$(1-x^2) \frac{d^2 v}{dx^2} - 2(m+1) \frac{dv}{dx} + (\beta - m - m^2) v = 0. \quad (2-16)$$

Полагают, что

$$v = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i, \quad (2-17)$$

где i — целые числа.

Беря первую и вторую производные v по x , используя выражение (2-17) и подставляя полученные результаты в уравнение (2-16), придем окончательно к следующему алгебраическому уравнению:

$$\sum_i [i(i-1)a_i^{i-2} - i(i-1)a_i x^i - 2(m+1)ia_i x^i + + (\beta - m - m^2)a_i x^i] = 0.$$

Так как это уравнение должно быть справедливым для любых значений x , необходимо, чтобы коэффициент при x любой степени был равен нулю, т. е.

$$(i+1)(i+2)a_{i+2} - [i(i-1) + 2(m+i)i - (\beta - m - m^2)]a_i = 0,$$

откуда получим рекуррентную формулу следующего вида:

$$a_{i+2} = \frac{i(i-1) + 2(m+i)i - (\beta - m - m^2)}{(1+i)(2+i)} a_i. \quad (2-18)$$

Для получения конечных решений необходимо прибегнуть к обычному для задач квантовой механики приему, а именно к обрыву ряда (2-18) на некотором члене $i=n$. В этом случае все коэффициенты ряда, начиная с a_{i+2} и далее, обращаются в нуль, т. е.

$$i(i-1) + 2(m+i)i - (\beta - m - m^2) = 0,$$

откуда

$$\beta = (i+m)(i+m+1) = l(l+1), \quad (2-19)$$

где $l=m+i$ является орбитальным квантовым числом.

Так как

$$\beta = \frac{2I_0 E}{\hbar^2}, \quad (2-20)$$

то, подставляя вместо β его значение из (2-20), находим из (2-19) для энергии следующее выражение:

$$E_l = \frac{1}{2I_0} l(l+1) \hbar^2, \quad (2-21)$$

где $l(l+1)\hbar^2 = P_l^2$ — квадрат орбитального момента частицы (в частности, электрона). Таким образом, спектр собственных значений E_l получается дискретным, определяемым орбитальным квантовым числом l . Такие спектры называются вращательными (ротационными).

Полезно еще раз возвратиться к вопросу о соотношении величин орбитального момента и его максимальной проекции на произвольно выбранную ось z . Согласно боровской теории (т. е. с позиции классических представлений) это отношение должно быть равно единице, т. е. $p_l^2 = p_{l z_{\max}}^2 = \hbar^2 l^2$ (поскольку максимальная величина $m_l = l$).

Квантовая механика дает несколько отличный результат, а именно:

$$p_l^2 = p_{lz_{\max}}^2 + \hbar^2 l,$$

т. е. всегда $p_l^2 > p_{lz_{\max}}^2$ и не может быть такого случая, когда p_l^2 совпадает со значением p_{lz}^2 . Наличие дополнительного члена $\hbar^2 l$ и неудовлетворение условию $p_l^2 = p_{lz}^2$ объясняется некоммутативностью проекций операторов момента p_{lx} , p_{ly} , p_{lz} друг с другом. Иными словами, одновременное точное задание всех трех проекций в принципе невозможно. Если же случай $p_{lz}^2 = p_l^2$; $p_{lx} = p_{ly} = 0$ признать возможным, то тем самым будет отвергнуто приведенное выше утверждение о некоммутативности операторов.

2.14. ВОДОРОДОПОДОБНЫЙ АТОМ

Уравнение Шредингера для водородоподобного атома. Задача о водородном атоме является основной задачей квантовой механики. Это объясняется тем, что задача о движении электрона в поле центральных сил, как об этом уже упоминалось ранее, относится не только к атому водорода, но она может быть распространена с тем или иным приближением на более сложные атомы, в первую очередь на атомы щелочных металлов, в которых внешний электрон, слабо связанный с ядром, движется в поле ядра и так называемого атомного остатка. Внутренние электроны экранируют внешний электрон от поля ядра и тем самым ослабляют действие последнего на этот электрон. Однако распределение поля нарушается при этом незначительно, и без особой погрешности его можно считать таким же, как и у атома водорода, но со значением заряда ядра, равным Ze , где Z — атомный номер ядра.

Водородоподобный атом представляет собой систему двух точечных зарядов — ядра и электрона, между которыми действует кулоновская сила. Потенциальная энергия при этом равна:

$$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}; \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2},$$

где $+Ze$ — заряд ядра, $-e$ — заряд электрона, r — расстояние между ядром и электроном.

Уравнение Шредингера для этого случая примет вид:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0.$$

Для упрощения математической записи вводят так называемые единицы Хартри, согласно которым масса электрона, его заряд и постоянная \hbar принимаются равными единице, т. е.

$$m_0 = 1; \quad e = 1; \quad \hbar = 1.$$

Кроме того, в целях дальнейшего упрощения записи воспользуемся при решении данной задачи гауссовой системой единиц. Тогда уравнение запишется в следующем виде:

$$\nabla^2 \psi + 2 \left(E + \frac{Z}{r} \right) \psi = 0.$$

Будем считать, как это принято в упрощенной теории атома, ядро неподвижным и находящимся в начале координат.

Разделение переменных в сферических координатах. Используя сферическую систему координат, получаем:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \\ + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + 2 \left(E + \frac{Z}{r} \right) \psi = 0. \end{aligned}$$

Заметим, что составляющими оператора \hat{p}^2 здесь являются:

$$\begin{aligned} \hat{p}_r^2 = \frac{1}{2r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right); \quad \hat{p}_\vartheta^2 = \frac{1}{2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right); \\ \hat{p}_\varphi^2 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \end{aligned}$$

а оператор квадрата момента количества движения

$$\hat{M}^2 = \frac{1}{2r^2} \left(\hat{p}_\vartheta^2 + \frac{\hat{p}_\varphi^2}{\sin^2 \vartheta} \right). \quad (2-22)$$

Используя метод разделения переменных, решение уравнения (2-22) запишем в виде:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \theta(\vartheta) \Phi(\varphi).$$

Подстановка его в уравнение (2-22) приводит к двум независимым уравнениям:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + 2(Er^2 + Zr) = \beta; \quad (2-23)$$

$$-\frac{1}{\theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\theta}{d\vartheta} \right) + \frac{1}{\Phi \sin^2 \vartheta} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -\beta, \quad (2-24)$$

где β — постоянная разделения, равная:

$$\beta = \frac{2I_0 E}{h^2}.$$

Уравнение (2-24) уже было нами рассмотрено в задаче о жестком ротаторе, поэтому для функций θ и Φ мы можем воспользоваться готовыми решениями.

Радиальное уравнение. Обратимся к уравнению (2-23), называемому радиальным уравнением. Поскольку параметр β известен и равен $l(l+1)$, это уравнение после деления на r^2 может быть записано в таком виде:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[2E + 2 \frac{Z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0. \quad (2-25)$$

При решении этого уравнения следует учесть, что энергия атома при принятых нами выше условиях отрицательна, т. е.

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} < 0.$$

Обычно находят сначала асимптотическое решение уравнения (2-25), т. е. то, которое соответствует условно $r \rightarrow \infty$. В этом случае уравнение преобразуется в следующее:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + 2ER = 0,$$

откуда для функции R , которую мы обозначим через R_α , получим решение:

$$R_\alpha = A_1 e^{\alpha r} + B_1 e^{-\alpha r}, \text{ где } \alpha = \sqrt{-2E}.$$

Так как это решение должно быть конечным, то необходимо, чтобы $A_1 = 0$ и тогда

$$R_\alpha = B_1 e^{-\alpha r}.$$

Для точного решения выбирают функцию R в таком виде:

$$R = R_\alpha v \approx e^{-\alpha r} v. \quad (2-26)$$

Подставляя (2-26) в уравнение (2-25), получаем:

$$\frac{d^2 v}{dr^2} + 2 \left(\frac{1}{r} - \alpha \right) \frac{dv}{dr} + \left[\frac{2}{r} (-\alpha + Z) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] v = 0. \quad (2-27)$$

Решение этого уравнения ищут в виде:

$$v = r^\gamma \sum_{i=0}^{\infty} a_i r^i, \quad (2-28)$$

где γ — постоянная.

Постоянную γ подбирают таким образом, чтобы в уравнении (2-27) коэффициенты при членах с отрицательными показателями обращались в нуль.

Используя (2-28) и подставляя это решение в уравнение (2-27), получаем:

$$\sum_{i=0} [(\gamma + i)(\gamma + i - 1) a_i r^{\gamma+i-2} + 2(\gamma + i) a_i r^{\gamma+i-2} - \\ - a_i l(l+1) r^{\gamma+i-2} - 2\alpha(\gamma + i) a_i r^{\gamma+i-1} - 2a_i(-\alpha + Z) r^{\gamma+i-1}] = 0. \quad (2-29)$$

Приравниваем в этом уравнении коэффициенты при наименьшей степени r нулю, т. е. у $r^{\gamma-2}$ при $i=0$, тогда

$$\gamma(\gamma-1) + 2\gamma - l(l+1) = 0$$

или

$$\gamma^2 + \gamma - l(l+1) = 0.$$

Из этого уравнения найдем:

$$\gamma_1 = 1; \quad \gamma_2 = -(l+1). \quad (2-30)$$

Условием решения уравнения (2-29) является равенство нулю коэффициентов при всех степенях r :

$$[(\gamma + i + 1)(\gamma + i) + 2(\gamma + i - 1) - l(l+1)] \times \\ \times a_{i+1} - [2\alpha(\gamma + i) + 2(-\alpha + Z)] a_i = 0.$$

Отсюда получаем формулу, связывающую между собой соседние коэффициенты:

$$a_{i+1} = \frac{2[\alpha(\gamma + i) - (\alpha - Z)]}{(\gamma + i + 1)(\gamma + i) - 2(\gamma + i - 1) - l(l+1)} a_i.$$

Условие конечности ψ приводит, как и в прежних задачах, к необходимости оборвать ряд $R = e^{-\alpha r} \sum_{i=0}^{\infty} a_i r^{\gamma+i}$ на некотором члене n_r .

Поэтому все коэффициенты ряда, начиная с $(n_r + 1)$ и далее, должны быть равны нулю:

$$\alpha(\gamma + n_r) + \alpha - Z = 0,$$

откуда

$$\alpha = \frac{Z}{\gamma + n_r + 1}.$$

Так как $\alpha = \sqrt{-2E}$, то

$$E_n = - \frac{Z^2}{2(\gamma + n_r + 1)^2}.$$

Уровни энергии. Для положительных значений l [см. формулу (2-30)] получим выражение для стационарных состояний атома с энергиями:

$$E_n = - \frac{Z^2}{2(l + n_r + 1)^2}.$$

Переходя от единиц Хартри к обычным, получим:

$$E_n = - \frac{m_0 Z^2 e^4}{2h^2 (n_r + l + 1)^2} = - \frac{m_0 Z^2 e^4}{2h^2 n^2}, \quad (2-31)$$

где $n = l + n_r + 1$ является главным квантовым числом.

Из (2-31), видно, что формула имеет точно такой же вид, что и в теории Бора:

$$E_n = - \frac{m_0 Z^2 e^4}{2h^2 n^2}, \text{ где } n_\phi + n_r.$$

Однако по теории Бора значение $n_\phi = 0$ не имеет смысла, так как

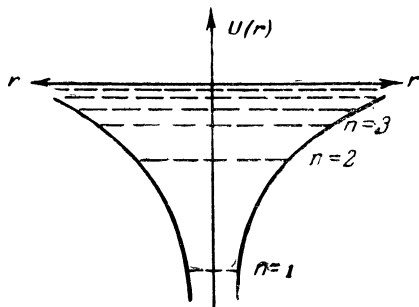


Рис. 2-24. Схема энергетических уровней атома водорода.

при $n_r = 0$ главное квантовое число обращается в нуль, а величина энергии E_0 — в бесконечность.

Согласно же квантовой механике главное квантовое число n при $n_r = 0$, $l = 0$ имеет значение, равное единице ($n = 1$) и при этом энергия

$$E_1 = - \frac{m_0 Z^2 e^4}{2h^2}.$$

Выражения для энергии, записанные в системе СИ, соответственно примут вид:

$$E_n = - \frac{m_0 Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 h^2 n^2};$$

$$E_1 = - \frac{m_0 Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 h^2}.$$

Представляет интерес сопоставить графики энергетических уровней потенциальной ямы (хотя бы одномерной) и атома водорода (рис. 2-21 и 2-24).

Из сравнения этих рисунков видно, что атом водорода, который может быть назван кулоновой ямой, представляет собой как бы «вывернутую наизнанку» потенциальную яму, имеющую вид «воронки» (см. рис. 2-24). Эта яма конечна по направлению от ядра и бесконечно глубока по направлению к ядру. Следует учесть также, что если в случае потенциальной ямы мы имели дело с функциями типа плоских волн, то в атоме водорода решениями являются сферические гармоники, амплитуды которых зависят от координаты r . Все эти обстоятельства нашли отражение в самом виде выражений для E_n , т. е. в знаке и зависимости ее от числа n :

Потенциальная яма:

$$E_n \sim +n^2$$

Атом водорода:

$$E_n \sim -\frac{1}{n^2}.$$

Квантовые числа. Обратимся еще раз к общему решению для волновой функции:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\theta(\theta)\Phi(\varphi),$$

где

$$R = e^{-\frac{Z}{n}r} \sum_{i=0}^{i=n_r} a_i r^{i+1}; \quad \theta_l^m = (1-x^2) P_l(x); \quad \Phi = e^{\pm im\varphi}.$$

Таким образом, в общем решении для ψ содержатся три рода индексов: n_r , l , m (последний индекс мы обозначим, как и ранее через m_l , а $n_r + l + 1 = n$). Из предыдущего изложения следует, что они представляют собой последовательность целых чисел, а именно:

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, \dots; \\ l &= 0, 1, 2, \dots; (n-1); \\ m_l &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots; \pm l. \end{aligned}$$

Это и есть квантовые числа, где n — главное квантовое число, l — орбитальное квантовое число, m_l — магнитное квантовое число.

Напомним, что если в теории Бора квантовые числа определяют конкретную орбиту, то в волновой механике может идти о так называемом «электронном облаке», как геометрическом месте точек, в которых может оказаться электрон с той или иной вероятностью. Плотность такой вероятности, как известно, определяется квадратом модуля волновой функции, т. е. $\psi^*\psi = |\psi|^2$. Поскольку

$$\psi = e^{-im_l\varphi} (1-x^2) P_l(x) e^{-\frac{Z}{n}r} \sum_{i=0}^{i=n_r} a_i r^{i+1},$$

то, записывая более сокращенно, получаем:

$$\psi^*\psi = |\psi|^2 = (\theta_l^m)^2 e^{-\frac{2rZ}{n}} \left(\sum_{i=0}^{i=n_r} a_i r^{i+1} \right)^2.$$

Основное состояние. Рассмотрим простейший случай, когда $n_r=0$; $l=0$; $m_l=0$; $n=1$.

В этом случае

$$\theta_0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \quad R = e^{-Zr} a_0$$

и

$$\psi_0 = \frac{a_0}{\sqrt{4\pi}} e^{-Zr}.$$

Вероятность того, что электрон находится в шаровом слое, ограниченном радиусами r и $r+dr$, будет равна:

$$|\psi_0|^2 dV = \frac{a_0^2}{4\pi} e^{-2Zr} r^2 dr \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi = a_0^2 e^{-2Zr} r^2 dr.$$

Наибольшую вероятность можно определить обычным способом, приравняв первую производную от полученного выражения нулю:

$$\frac{d}{dr} (e^{-2Zr} r^2) = 2 (r - Zr^2) e^{-2Zr} = 0,$$

откуда

$$r = \frac{1}{Z} = r_1 \text{ (в атомных единицах).}$$

Так как для водорода $Z=1$, то величина $r=r_1$ совпадает с радиусом первой боровской орбиты (также в атомных единицах). Состояние атома, описываемое функцией ψ_0 , называется основным

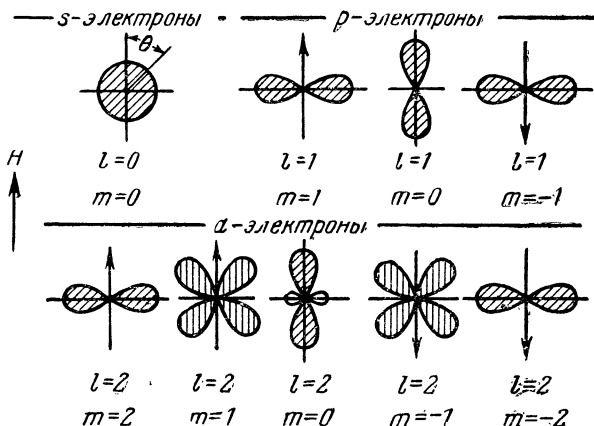


Рис. 2-25. Угловая зависимость плотности электронного облака для некоторых состояний атома водорода.

(невозбужденным). В этом случае волновая функция зависит только от расстояния между электроном и ядром, т. е. является сферически симметричной. Такое состояние называется *s*-состоянием. Оно характеризуется следующими квантовыми числами: $n=1$ ($l=0$, $m_l=0$) и обозначается через ψ_0 . Функция ψ_0 является в данном случае единственной (невырожденное состояние).

Первое возбужденное состояние соответствует квантовым числам: $n=2$ ($l=0, 1$; $m_l=0, \pm 1$). Это состояние, вообще говоря, является четырехкратно вырожденным. Одна из волновых функций, обозначаемая через $2s$, остается сферически симметричной, три другие (состояния $2p$) — зависят от угловых координат. При $n=3$ ($l=0, 1, 2$; $m_l=0, \pm 1, \pm 2$) состояние становится девятикратно вырожденным, т. е. волновых функций имеется уже 9: одна $3s$ -функция; три $3p$ -функции и пять $3d$ -функции. Угловая зависимость плотности электронного облака ($\psi^*\psi$) для некоторых состояний атома приведена на рис. (2-25), заимствованного из книги А. Р. Хиппеля [36].

2-15. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Общие замечания. Несовместимость определенных групп измерений является весьма характерной особенностью квантовой механики. Это свойство получило свое математическое выражение в виде некоммутативности операторов канонически сопряженных величин. Так, например, соотношения для импульсов и координат имеют следующий вид:

$$\hat{p}_x x - x \hat{p}_x = i\hbar; \quad \hat{p}_y y - y \hat{p}_y = -i\hbar; \quad \hat{p}_z z - z \hat{p}_z = -i\hbar.$$

В этих соотношениях \hat{p}_x , \hat{p}_y , \hat{p}_z являются операторами дифференциального типа:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}; \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$$

В то же время координаты x , y , z представляют собой операторы обычного умножения, т. е. являются просто числами. Приведенные соотношения относятся к так называемому координатному представлению волновой функции, т. е. такому, при котором аргументами функции ψ являются координаты: $\psi = \psi(q)$.

Однако при решении конкретных задач часто появляется необходимость использовать волновую функцию не в координатном, а в ином представлении, например импульсном или энергетическом.

Таким образом, возникает задача о переходе к волновым функциям в представлении, отличном от задан-

ного. Этот переход совершается с помощью обычного преобразования Фурье. Если речь идет о дискретных спектрах (например, дискретном спектре энергии), то прибегают к ряду Фурье:

$$\psi(q) = \sum_n \psi(E_n) \psi_E(q);$$

$$\psi(E_n) = \int \psi(q) \psi_E^*(E_n, q) dq.$$

Для сплошных спектров (например, сплошного спектра импульсов) используют интеграл Фурье:

$$\psi(q) = \int \psi(p) \psi_p(q) dp;$$

$$\psi(p) = \int \psi(q) \psi_p^*(p, q) dq.$$

Переход к импульсному представлению. В приведенных выражениях функции с индексами E и p (ψ_E и ψ_p) являются собственными функциями соответствующих операторов (энергии и импульса). Для того чтобы придать формулам обычный для преобразования Фурье вид, обратимся к уравнению Шредингера для собственных функций $\psi_p(q)$ оператора импульса \hat{p} :

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \psi_p = p \psi_p.$$

Решение этого уравнения имеет вид:

$$\psi_p(q) = \psi_p^{(0)} e^{\frac{i}{\hbar} p q} = \psi_p(0) e^{\frac{i}{\hbar} p q}.$$

Обычно нормируют эту функцию так, чтобы

$$\psi_p^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

Используя найденные для $\psi_p(q)$ (а следовательно, и $\psi_p^*(q)$) выражения, получаем:

$$\psi(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(p) e^{\frac{i}{\hbar} p q} dp;$$

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(q) e^{-\frac{i}{\hbar} p q} dq.$$

Если воспользоваться этими формулами, то не представляет труда показать, что в импульсном представлении оператор координат имеет вид:

$$\hat{q} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p},$$

а оператор импульса

$$\hat{p} = p.$$

Очевидно, что этот вид операторов также удовлетворяет перестановочным соотношениям.

Полученный выше результат с преобразованием $\psi(q) \rightarrow \psi(p)$, при котором были осуществлены следующие переходы:

$$\hat{q} = q \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial p}; \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \rightarrow p$$

можно распространить на любые другие пары такого рода переменных. Это позволяет сформулировать следующее правило: в рассматриваемых нами перестановочных соотношениях один из сомножителей всегда является оператором обычного умножения, а другой — дифференциальным оператором, в котором в качестве независимой переменной фигурирует канонически сопряженный ему оператор умножения.

Переход к различным представлениям в задачах квантовой механики. Изложенные выше свойства волновых функций являются для квантовой механики фундаментальными, так как они непосредственно связаны с тем, что составляет специфику квантовых систем и их принципиальное отличие от классических. Основным смыслом преобразования функций может быть уяснен из следующих рассуждений.

Предположим, что имеется система и известно ее состояние, заданное в виде волновой функции $\psi(q)$. Нам необходимо определить все возможные значения ее энергии, которые с той или иной вероятностью могут быть получены при соответствующих измерениях. Для этого исходная функция $\psi(q)$ должна быть разложена в ряд по собственным функциям оператора энергии и затем из решения уравнений Шредингера могут быть найдены собственные значения оператора, представляющие собой значения потенциально возможных энергий.

При этом вероятность получения каждого данного значения E_i будет равна квадрату коэффициента разложения c_i при соответствующей собственной функции $\psi_i(q)$.

2-16. ОСНОВНЫЕ ИДЕИ И ПРИНЦИПЫ МАТРИЧНОЙ МЕХАНИКИ

Матрицы в квантовой механике. Дальнейшим шагом в теории представлений является преобразование самих операторов. Это приводит к другой форме квантовой механики, известной под названием матричной, основы которой были разработаны В. Гейзенбергом в 1925 г., почти одновременно с формулировкой Шредингером основ волновой механики (1926 г.).

Основным принципом построения матричной механики явился отказ от описания поведения микросистем с помощью ненаблюдаемых физических величин, таких, как орбита электрона, его мгновенные координаты, импульс и т. д. В качестве основных величин были выбраны частота и интенсивность излучения, т. е. те величины, которые могут быть определены экспериментальным путем.

При дальнейшем развитии этой теории оказалось, что между ней и волновой механикой Шредингера имеется прямая связь, что послужило лишним подтверждением справедливости обоих подходов к разработке теории квантовых явлений. Эта связь выражается в следующем. Известно, что под средним значением какой-либо величины в волновой механике понимают интеграл следующего вида:

$$\langle L \rangle = \int \psi^* \hat{L} \psi dV. \quad (2-32)$$

Если речь идет об ансамбле чистых состояний, то соответствующая ему волновая функция ψ может быть разложена в ряд по собственным функциям:

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n.$$

В этом случае для каждой функции ψ_n можно написать аналогично (2-32) выражение:

$$\langle L \rangle = L_n = \int \psi_n \hat{L} \psi dV, \quad (2-33)$$

где L_n — собственное значение оператора L .

Пользуясь двойными индексами, соответствующими индексом двух сопряженных функций ψ_n^* и ψ_n , можно переписать выражение (2-33) в таком виде:

$$L_{nn} = \int \psi_n^* \hat{L} \psi_n dV.$$

Комбинируя попарно функции с различными индексами ψ_m^* и ψ_n , придем к бесконечному ряду средних величин, в общем случае зависящих от времени, следующего вида:

$$L_{mn}(t) = \int \psi_m^* \hat{L} \psi_n dV. \quad (2-34)$$

Полученные значения L_{mn} Гейзенберг рассматривает как элементы бесконечной матрицы:

$$L(t) = \begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} & L_{13} & \dots \\ L_{21} & L_{22} & L_{23} & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ L_{i1} & L_{i2} & L_{i3} & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{vmatrix}. \quad (2-35)$$

Здесь и далее матрицу мы будем обозначать большой буквой, а ее элементы той же буквой, но с двумя индексами внизу, например L_{mn} , где первый индекс относится к номеру строки, а второй — к номеру столбца.

Вместо интеграла по объему от произведения комплексно сопряженных волновых функций, относящихся к двум различным состояниям системы, Дирак ввел обозначение следующего вида:

$$\langle n | m \rangle.$$

Символ $| \rangle$ называется «кет-вектором», а символ $\langle |$ — «бра-вектором». [«Бра» и «кет» являются двумя слогами английского слова bracket (скобка)].

«Кет-вектор» относится к исходному (начальному) состоянию, а «бра-вектор» — к конечному состоянию.

В этих обозначениях матричный элемент имеет следующий вид:

$$\langle n | \hat{M} | m \rangle.$$

Эта форма записи приведена потому, что она встречается в специальной литературе и ее следует знать.

В дальнейшем этими символами мы пользоваться не будем.

Матрица энергии. Если над волновой функцией $\psi(q)$ произведем некоторую операцию с помощью, например, оператора $\hat{H}(q)$, то получим новую функцию:

$$\hat{H}(q)\psi(q) = \varphi(q).$$

Каждую из этих функций $[\psi(q)$ и $\varphi(q)]$ можно разложить в ряд по собственным функциям $\psi_n(q)$ оператора $\hat{H}(q)$. В результате такого разложения получим:

$$\psi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q); \quad (2-36)$$

$$\varphi(q) = \sum_n b_n \psi_n(q). \quad (2-37)$$

Если совокупность коэффициентов c_n представляет собой исходную волновую функцию в E -представлении, то совокупность b_n является тем же самым по отношению к функции $\varphi(q)$. Таким образом, задача сводится к установлению связи между коэффициентами c_n и b_n . Эта связь непосредственно следует из написанных ранее равенств (2-37) и (2-36):

$$\sum_n b_n \psi_n(q) = \sum_n c_n \hat{H} \psi_n(q).$$

Умножая обе части этого равенства на $\psi_m^* q$ и интегрируя по q , получаем (учитывая ортогональность ψ) следующую связь между коэффициентами:

$$b_m = \sum_n E_{mn} c_n;$$

$$E_{mn} = \int \psi_m^*(q) \hat{H} \psi_n(q) dq$$

является элементом матрицы энергии. Зная все величины E_{mn} и c_n , можно найти все b_n , являющиеся амплитудами вероятности в E -представлении. Таким образом,

совокупность E_{mn} следует рассматривать как оператор энергии в E -представлении (т. е. в собственном представлении).

Возвратимся к матрице (3-35). Если L явно от времени не зависит, то можно написать:

$$\Psi_n = \psi_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}; \quad \Psi_m^* = \psi_m^* e^{i \frac{E_m}{\hbar} t}$$

и тогда подытегральное выражение примет вид:

$$\psi_m^* \hat{L} \psi_n = \psi_m^* \hat{L} \psi_n e^{-\frac{E_n - E_m}{\hbar} t} = \psi_m^* \hat{L} \psi_n e^{-i \omega_{nm} t}.$$

Отсюда видно, что диагональные элементы матрицы L_{nn} , как не зависящие от времени, очевидно, соответствуют стационарным состояниям системы, а все остальные, являющиеся функциями времени:

$$L_{mn}(t) = L_{mn}^{(0)} e^{-i \omega_{nm} t}$$

каким-то образом связаны с переходными процессами от одного стационарного состояния к другому.

Поскольку число возможных переходов в обоих направлениях ($n \rightleftharpoons m$) всегда четное, то рассматриваемые нами матрицы будут квадратными.

Волновая и матричная механика. Из сказанного следует, что если в уравнениях волновой механики вместо обычных чисел фигурируют операторы, то в уравнениях матричной механики эту роль выполняют матрицы. Такой переход от операторов к матрицам явился своеобразной алгебраизацией волновых дифференциальных уравнений Шредингера.

Далее, определяемые с помощью операторов средние значения физически наблюдаемых величин являются не чем иным, как элементами соответствующих матриц.

Совершенно очевидно, что аналогия между операторами и матрицами в отношении идентичности их свойств идет значительно дальше: матрицы Гейзенберга являются (по тем же соображениям, что и операторы) линейными, эрмитовыми (самосопряженными) и, в общем случае, некоммутирующими.

Из сказанного становится очевидным, что волновые функции, фигурирующие в интегралах (3-35) и участ-

вующие в построении матричных элементов, удовлетворяют уравнениям Шредингера. Иными словами, уравнения волновой механики и матричной механики эквивалентны. Однако каждый из этих методов имеет различную практическую ценность. В смысле физической наглядности преимущество имеет волновая механика; что же касается удобства количественного описания квантовых процессов, то предпочтение в некоторых случаях следует оказать матричной механике.

В частности, пользуясь понятием матричных элементов перехода, можно решить очень важную задачу, а именно по известному оператору \hat{L} найти среднее значение соответствующей ему наблюдаемой величины в том случае, когда собственные функции этого оператора неизвестны. Этот случай, в частности, имеет место при смешанном ансамбле, когда уравнение

$$\hat{L}\psi = L\psi$$

не удовлетворяется ни при каких значениях L . Сущность этого способа, известного под названием метода статистической матрицы (матрицы плотности), будет изложена в § 2-21 настоящей главы.

2-17. НЕКОТОРЫЕ СВЕДЕНИЯ ИЗ МАТРИЧНОЙ АЛГЕБРЫ

Сложение и умножение матрицы. Матрицей называется упорядоченная таблица чисел, над которыми можно производить по особым правилам алгебраические действия. В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением лишь квадратных матриц, т. е. таких, в которых число элементов в строке равно числу элементов в столбце.

Правило сложения матриц крайне просто. При сложении матриц складываются соответствующие друг другу элементы, т. е.

$$L_{mn} + M_{mn} = N_{mn},$$

где N_{mn} — элементы результирующей матрицы.

Более сложным является правило умножения матриц. Элементы результирующей матрицы, являющейся произведением двух матриц L и M , вычисляются по следующему правилу:

$$P_{mn} = \sum_k L_{mk} M_{kn}, \text{ где } k = 1, 2, 3 \dots$$

Таким образом, чтобы получить матричный элемент m -й строки и n -го столбца (P_{mn}) матрицы P , необходимо умножить элементы m -й строки матрицы L соответственно на элементы n -го столбца матрицы M и полученные произведения сложить.

Эрмитовские матрицы. Если в матрице L (с элементами L_{mn}) заменить строки столбцами, то получим транспонированную матрицу \tilde{L} . Элементы такой матрицы удовлетворяют, очевидно, следующему условию:

$$\tilde{L}_{mn} = L_{nm}.$$

Если все элементы матрицы L заменить комплексно сопряженными величинами, то получим комплексно сопряженную матрицу с элементами L^*_{mn} .

Если эту матрицу сделать транспонированной \tilde{L}^* , элементы которой равны $\tilde{L}^*_{mn} = L^*_{nm}$, то мы получим эрмитовски сопряженную матрицу.

Наконец, матрица, удовлетворяющая условию

$$L = \tilde{L}^*$$

и, следовательно, $L_{mn} = L^*_{nm}$, называется просто эрмитовской или самосопряженной матрицей.

Именно матрицы этого класса и используются в квантовой механике как матрицы, эквивалентные эрмитовским операторам.

Диагональные матрицы. Матрица, у которой все элементы, за исключением элементов, расположенных по главной диагонали, равны нулю, называется диагональной:

$$\left\| \begin{array}{cccc} L_{11} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & L_{22} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & L_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{array} \right\|.$$

В частном случае, когда все диагональные элементы равны единице ($L_{11} = L_{22} = \dots = 1$), матрица называется единичной:

$$\left\| \begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{array} \right\|.$$

2-18. ПРИМЕНЕНИЕ МАТРИЧНОГО МЕТОДА К ЗАДАЧАМ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Вначале остановимся лишь на стационарных задачах, решение которых с помощью уравнения Шредингера сводится к отысканию собственных функций и собственных значений оператора \hat{L} , изображающего в квантовой механике ту или иную механическую величину.

Известно, что если ψ_n является собственной функцией оператора \hat{L} , то собственное значение L_n этого оператора может быть найдено из уравнения

$$\hat{L}\psi_n = L_n\psi_n.$$

Умножив обе части этого уравнения на ψ_m^* и проинтегрировав по всему конфигурационному пространству, получим:

$$\int \psi_m^* \hat{L} \psi_n dV = L_n \int \psi_m^* \psi_n dV,$$

или, учитывая ортонормированность собственных функций,

$$L_{mn} = L_n \delta_{mn}, \text{ где } L_{mn} = \int \psi_m^* \hat{L} \psi_n dV.$$

Важным выводом здесь является то, что при указанной выше постановке задачи отличным от нуля оказываются лишь диагональные элементы матрицы L ($L_n \equiv L_{nn}$). Иными словами, любая физическая величина в своем собственном представлении изображается диагональной матрицей.

Таким образом, задача отыскания собственных значений какого-либо оператора сводится прежде всего к приведению произвольной матрицы оператора к диагональному виду. Эта операция является одним из основных этапов решения задач квантовой механики матричным методом.

Обратимся к выражению для среднего значения наблюдаемой величины L :

$$\langle L \rangle = \int \psi^* \hat{L} \psi dV.$$

Разложим волновые функции ψ^* и ψ в ряд по собственным функциям оператора \hat{L} :

$$\psi^* = \sum_m c_m^* \psi_m^*, \quad \psi = \sum_n c_n \psi_n.$$

Подставляя полученные выражения для $\langle L \rangle$, получаем:

$$\langle L \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \int \psi_m^* \hat{L} \psi_n dV,$$

где $\int \psi_m^* \hat{L} \psi_n dV$ — матричный элемент оператора \hat{L} .

Поэтому для среднего значения $\langle L \rangle$, записанного в матричной форме, мы имеем следующее выражение:

$$\langle L \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n L_{mn}.$$

Перейдем теперь к основному вопросу — задаче определения собственных функций и спектра собственных значений оператора \hat{L} .

Воспользуемся для этого волновым уравнением для амплитуды функции ψ :

$$\hat{L}\psi = L\psi. \quad (2-38)$$

Очевидно, что благодаря условиям, накладывающим ограничения на функцию ψ , уравнение (2-38) будет иметь отличные решения не при любых значениях L , а лишь при некоторых избранных L_1, L_2, \dots, L_n . Эти значения, называемые собственными, будут соответствовать собственным функциям $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$.

Любую волновую функцию ψ можно разложить по собственным функциям:

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n.$$

Подставив эту сумму в уравнение (2-38), получим:

$$\hat{L} \sum_n c_n \psi_n = L \sum_n c_n \psi_n.$$

Умножив обе части этого равенства на ψ_m^* и проинтегрировав по всему пространству, получим:

$$\sum_n c_n \int \psi_m^* \hat{L} \psi_n dV = L \sum_n c_n \int \psi_m^* \psi_n dV,$$

где $\int \psi_m^* \hat{L} \psi_n dV$ — матричный элемент матрицы L .

Так как

$$\int \psi_m^* \psi_n dV = \delta_{mn},$$

следовательно,

$$\sum_n c_n L_{mn} = L \sum_n c_n \delta_{mn}$$

или

$$\sum_n c_n (L_{mn} - L \delta_{mn}) = 0.$$

При решении практических задач обычно пользуются ограниченным числом членов n этого ряда и тогда пишут:

$$\sum_{i=1}^n c_i (L_{mi} - \delta_{mi} L) = 0; \quad m = 1, 2, \dots \quad (2-39)$$

Выражение (2-39) представляет собой сумму однородных линейных уравнений относительно n независимых переменных c_i . Система однородных уравнений имеет, как известно, отличные от нуля решения в том случае, если определитель, составленный из коэффициентов уравнений, равен нулю, т. е. в данном случае

$$\begin{vmatrix} L_{11}-L & L_{12} & L_{13} & \dots \\ L_{21} & L_{22}-L & L_{23} & \dots \\ L_{31} & L_{32} & L_{33}-L & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0.$$

Это выражение в развернутом виде является уравнением n -й степени относительно L . Получаемые при этом n корней L_1, L_2, \dots, L_n составляют дискретный спектр собственных значений оператора L . Если известно n корней L_i , то, подставляя их в уравнение (2-39), мы получим $(n-1)$ уравнений относительно отношений c_i/c_n , где $i=1, 2, \dots, (n-1)$.

Для полного определения коэффициентов c_i необходимо воспользоваться нормировкой волновых функций ψ :

$$\int \psi^* \psi dV = 1,$$

приводящей к соотношению

$$\sum_{i=1}^n |c_i|^2 = 1.$$

Задача будет доведена до конца при дополнительном условии удовлетворения матриц для канонически сопряженных переменных перестановочным соотношениям Гейзенберга:

$$pq - qp = -i\hbar,$$

если в решении будут фигурировать именно эти переменные.

2-19. ФУНКЦИЯ ДЕЙСТВИЯ И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ АНАЛИТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Ввиду того, что понятия и методы аналитической механики в виде уравнений Лагранжа и Гамильтона широко используются в квантовой механике, считаем полезным напомнить основную суть их.

Принцип наименьшего действия и уравнения Лагранжа. Функция действия, обозначаемая обычно через S , играет во многих разделах физики основную роль.

Действие можно представить в виде произведения двух величин, получивших в аналитической механике название канонически сопряженных переменных. К ним относятся, например, координата и соответствующая ей составляющая импульса, энергия и время, азимутальный угол и момент количества движения. Указанные переменные фигурируют в различных вариационных принципах механики, известных под названием принципов стационарного действия. Среди последних особое распространение получил принцип наименьшего действия Остроградского—Гамильтона. Из этого принципа вытекают наиболее универсальные методы описания движения различных по характеру и свойствам физических систем, а именно уравнения Лагранжа и канонические уравнения Гамильтона.

Роль этих уравнений и связанных с ними понятий в квантовой механике огромна. В следующем параграфе мы используем некоторые понятия этой теории, поэтому имеет смысл кратко напомнить основную суть этих уравнений. В уравнениях Лагранжа основной величиной является функция Лагранжа (сокращенно лагранжиан), называемая также кинетическим потенциалом и представляющая собой разность между кинетической и потенциальной энергиями рассматриваемой системы:

$$L = T - U.$$

Таким образом, за основу в описании движения системы принимаются в данном случае ее энергетические характеристики, являющиеся наиболее обобщенными характеристиками любых динамических процессов (механических, акустических, электромагнитных и т. д.). Величины T и U являются функциями координат и скоростей частиц, составляющих данную систему. Мгновенное состояние системы определяется, очевидно, совокупностью фиксированных в каждый данный момент времени координат и скоростей всех частиц системы.

Под координатами в общем случае следует понимать так называемые обобщенные координаты, обозначаемые обычно через q_i . Эти координаты представляют собой независимые функции времени, число которых для каждой системы равно числу ее степеней

свободы (т. е. $i=1, 2, \dots, f$, где f — число степеней свободы). Пространство, каждая точка которого характеризуется определенным числом обобщенных координат, называется конфигурационным пространством.

В частном случае обобщенными координатами могут быть обычные пространственные координаты, например декартовы координаты x, y, z . Так, например, если система состоит из N точек, движения которых независимы друг от друга, то, очевидно, полное число координат, описывающих состояние системы в целом, будет равно $3N$ (ибо положение каждой точки m_i описывается тремя координатами x_i, y_i, z_i).

Если между отдельными точками данной системы существуют определенные связи, то число степеней свободы уменьшится и соответственно сократится и число независимых переменных.

Для решения конкретной задачи с помощью уравнений Лагранжа необходимо прежде всего найти выражение функции Лагранжа:

$$L = T(\dot{q}_i) - U(q_i),$$

где $\dot{q}_i = dq_i/dt$ — обобщенная скорость.

Это возможно в том случае, если нам известны дополнительные данные о свойствах системы (в общем случае о ее инерционных, упругих и диссипативных свойствах).

Уравнения Лагранжа имеют вид:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0.$$

Эти уравнения являются следствием упомянутого нами выше принципа наименьшего действия. Суть этого принципа заключается в том, что функционал, являющийся интегралом действия

$$S = \int_{t_0}^{t_1} L(\dot{q}_i, q_i, t) dt$$

при движении частиц системы по действительным траекториям конфигурационного пространства, взятый между двумя заданными конфигурациями (состояниями) системы в заданные моменты времени t_0 и t_1 , принимает минимальное значение.

Канонические уравнения Гамильтона. Гамильтон поставил задачу найти уравнения механики, в которых в качестве независимых переменных фигурировали бы обобщенные координаты q_i и обобщенные импульсы p_i . Пространство обобщенных координат и обобщенных импульсов называется фазовым пространством. По аналогии с обычным определением импульса Гамильтон записал обобщенные импульсы в виде:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}.$$

Так как согласно Лагранжу

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i}, \quad (2-40)$$

следовательно,

$$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}.$$

Система уравнений (2-40) представляет собой $3N$ уравнений (где N — число точек системы, а $3N$ — число координат всех точек данной системы) для $9N$ переменных p_i, q_i, \dot{q}_i . Исключив из нее переменные \dot{q}_i , мы получим новую систему уравнений лишь с двумя независимыми переменными q_i, p_i .

Такой системой явятся уравнения первого порядка, называемые каноническими уравнениями Гамильтона:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i},$$

где $H = H(p_i, q_i)$ представляет собой так называемую функцию Гамильтона (гамильтониан). В том случае, когда эта функция явно от времени не зависит, это означает, что система консервативна, т. е. что запас энергии в ней неизменен:

$$H(p_i, q_i) = T + U = \text{const.}$$

(функция Гамильтона представляет собой выражение полной энергии системы).

Действительно, используя уравнения Гамильтона, находим:

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \sum \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = \\ &= \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0. \end{aligned}$$

Скобки Пуассона. Широко используемым в квантовой механике соотношением являются так называемые «скобки Пуассона». Здесь мы рассмотрим их классический вариант.

Пусть имеется произвольная функция $F(q_i, p_i, t)$. Возьмем ее производную по времени:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial t} \right).$$

Используя канонические уравнения Гамильтона, можно переписать полученное выражение в следующем виде:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial F}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} \right).$$

Выражение под знаком суммы обычно сокращенно записывают в виде (H, F) и называют «классическими скобками Пуассона»

Если F явно от времени не зависит, то $\partial F/\partial t=0$ и, очевидно,

$$\frac{dF}{dt} = (H, F). \quad (2-41)$$

Используя понятие скобок Пуассона, можно дать следующее определение канонически сопряженных переменных: канонически сопряженными переменными являются такие переменные, которые удовлетворяют условиям:

$$(p, q) = 1; (p, p) = 0; (q, q) = 0.$$

Действительно, полагая $H=p$ и $F=q$ (частные случаи $H(p_i, q_i, t)$ и $F(p_i, q_i, t)$, можно написать:

$$(p, q) = \frac{\partial p}{\partial p} \frac{\partial q}{\partial q} - \frac{\partial p}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial p} = 1;$$

$$(p, p) = \frac{\partial p}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial q} - \frac{\partial p}{\partial q} \frac{\partial p}{\partial p} = 0;$$

$$(q, q) = \frac{\partial q}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial p} - \frac{\partial q}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial p} = 0.$$

Предположим, теперь, что $F=q$. Тогда, используя выражение (2-41), получаем:

$$\dot{q} = \left(\frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial q}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial p}{\partial p} \right) = \frac{\partial H}{\partial p}.$$

Полагая $F=p$, получаем:

$$\dot{p} = \left(\frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial p}{\partial p} \right) = - \frac{\partial H}{\partial q}.$$

Таким образом, с помощью скобок Пуассона уравнения Гамильтона можно записать в следующем виде:

$$\frac{dq}{dt} = (H, q); \quad \frac{dp}{dt} = (H, p).$$

2-20. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ В ШРЕДИНГЕРОВОМ И ГЕЙЗЕНБЕРГОВОМ ПРЕДСТАВЛЕНИЯХ

Шредингерово представление. Предположим, что средние значения искомых величин не остаются во времени постоянными. Для того чтобы учесть зависимость $\langle L \rangle$ от времени, обратимся к уравнению Шредингера:

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (2-42)$$

Для среднего значения какого-либо оператора L можно написать:

$$\langle L \rangle = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dV. \quad (2-43)$$

Возьмем производную по времени от этого выражения:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle L \rangle = \int \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi dV + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{L} \Psi dV + \\ - \int \Psi^* \hat{L} \frac{\partial \Psi}{\partial t} dV. \end{aligned} \quad (2-44)$$

Из уравнения (2-42) найдем:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi,$$

а для комплексно сопряженной функции

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi^*.$$

Подставляя эти выражения в (2-44), получаем:

$$\frac{d}{dt} \langle L \rangle = \int \Psi^* \left\{ \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} (\hat{L} \hat{H} - \hat{H} \hat{L}) \right\} dV.$$

Сравнивая это выражение, например, с (2-43) мы вправе утверждать, что полученное нами выражение $d/dt \langle L \rangle$ является не чем иным, как средним значением величины от оператора следующего вида:

$$\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} (\hat{L} \hat{H} - \hat{H} \hat{L}).$$

Второе слагаемое этого оператора называется квантовыми скобками Пуассона и сокращенно обозначается

$$[\hat{H}, \hat{L}] = \frac{1}{i\hbar} (\hat{H} \hat{L} - \hat{L} \hat{H}).$$

Таким образом, выражение для $d/dt \langle L \rangle$ можно переписать в следующем виде:

$$\frac{d}{dt} \langle L \rangle = \int \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi dV + \int \Psi^* [\hat{H}, \hat{L}] \Psi dV$$

или

$$\frac{d}{dt} \langle L \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle L \rangle + \langle [H, L] \rangle. \quad (2-45)$$

Выражение (2-45) обычно принимают за оператор производной по времени от оператора \hat{L} , т. е.

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{L}]. \quad (2-46)$$

Это и есть квантовомеханическое уравнение движения в шредингеровом представлении.

Закон сохранения энергии. Запишем:

$$\frac{d}{dt} \langle L \rangle = \langle \frac{dL}{dt} \rangle = \int \Psi^* \frac{d\hat{L}}{dt} \Psi dV,$$

т. е. производная по времени от среднего равна среднему от производной по времени. В том случае, если величина L явно от времени не зависит, то

$$\langle \frac{dL}{dt} \rangle = \langle [H, L] \rangle$$

и

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = [\hat{H}, \hat{L}].$$

В частном случае, когда $\hat{L} = \hat{H}$, мы получим:

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{H}].$$

Если \hat{H} явно от времени не зависит, то

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = 0.$$

Это означает, что полная энергия, остающаяся во времени неизменной, является интегралом движения. Иными словами, это условие выражает закон сохранения энергии.

Гейзенбергово представление. До сих пор мы говорили лишь об операторах, не касаясь их связи с гейзенберговыми матрицами. В силу того, что было ранее сказано о связи между операторами и средними значениями механических величин при представлении волновой функции суперпозицией собственных функций оператора, мы можем написать аналогичное (2-46) уравнение для каждого элемента матрицы L :

$$\left(\frac{dL}{dt}\right)_{mn} = \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} + [H, L]_{mn}.$$

Это уравнение и является матричной формой уравнений движения квантовой механики.

2-21. ПОНЯТИЕ О СТАТИСТИЧЕСКОЙ МАТРИЦЕ (МАТРИЦЕ ПЛОТНОСТИ)

Смешанные ансамбли и матрицы плотности. В § 2-6 настоящей главы мы упомянули о том, что, используя матричные элементы L_{mn} , можно найти выражение для среднего значения наблюдаемой величины в случае, когда собственные функции оператора неизвестны или, точнее, когда состояние системы не может быть описано волновой функцией. Такой случай является типичным для ансамбля смешанных состояний.

Как известно, такой ансамбль можно рассматривать как некогерентную смесь чистых ансамблей, каждый из которых описывается определенной волновой функцией ψ^i , где $i=1, 2, \dots, n$. Статистический вес каждого такого ансамбля определяется множителем $g(i)$, где

$$g(i) = \frac{N_i}{N}.$$

Здесь N_i — число частиц, составляющих i -й чистый ансамбль, а $N = \sum_i N_i$ — полное число частиц смешанного ансамбля.

Очевидно, что

$$\sum_i g(i) = 1.$$

Для вычисления среднего значения $\langle L \rangle$ смешанного состояния необходимо прежде всего определить ве-

роятность значений этой величины в каждом чистом состоянии $\psi^{(i)}$, т. е.

$$\langle L^{(i)} \rangle = \int \psi^{(i)*} \hat{L} \psi^{(i)} dV. \quad (2-47)$$

Затем полученные таким образом средние величины еще раз усреднить в соответствии со статистическими весами $g(i)$, т. е.

$$\langle L \rangle = \sum_i g(i) \langle L^{(i)} \rangle. \quad (2-48)$$

Но произвольную волновую функцию $\psi^{(i)}$ можно представить суперпозицией состояний:

$$\psi^{(i)} = \sum_n c_n^{(i)} \psi_n,$$

а для комплексно сопряженной функции

$$\psi^{(i)*} = \sum_m c_m^{(i)*} \psi_m^*.$$

Подставляя выражения для $\psi^{(i)}$ и $\psi^{(i)*}$ в (2-47), получаем:

$$\langle L^{(i)} \rangle = \sum_m \sum_n c_m^{(i)*} c_n^{(i)} L_{mn}, \quad (2-49)$$

где

$$L_{mn} = \int \psi_m^* \hat{L} \psi_n dV.$$

Используя (2-48) и (2-49), находим:

$$\langle L \rangle = \sum_i g(i) \sum_m \sum_n c_m^{(i)*} c_n^{(i)} L_{mn}.$$

Обозначим через

$$\rho_{mn} = \sum_i g(i) c_m^{(i)*} c_n^{(i)} \quad (2-50)$$

величину матричного элемента некоторой матрицы ρ . Таким образом среднее значение определяемой величины будет равно:

$$\langle L \rangle = \sum_m \sum_n \rho_{mn} L_{mn}.$$

Производя умножение по правилам матричной алгебры и обозначая $mn=k$, получаем:

$$\langle L \rangle = \sum_k L_{kk} = \sum_k (L\rho)_{kk}.$$

Следовательно, мы можем констатировать, что искомая величина равна сумме диагональных членов результирующей матрицы. В матричном исчислении такая сумма обозначается символом Sp и называется шпуром, или следом:

$$\langle L \rangle = \text{Sp}(L\rho). \quad (2-51)$$

Матрица $L\rho$ с элементами $(L\rho)_{kk}$ называется статистической матрицей, или матрицей плотности. С помощью этой матрицы, как это видно из выражения (2-51), может быть вычислено среднее значение любой физической величины, характеризующей ансамбль как чистых состояний, так и смешанных состояний, и в этом смысле матрица является достаточно универсальной.

Изменение матрицы плотности во времени. Если состояние системы не является стационарным, то возникает вопрос об определении закона изменения матрицы плотности во времени. Эта задача решается следующим образом.

В выражении для ρ_{mn} (2-50) мы должны считать коэффициенты $c^{(i)*}$ и $c_n^{(i)}$ зависящими от времени:

$$\rho_{mn} = \sum_i g(i) c_m^{(i)*}(t) c_n^{(i)}(t).$$

Производная по времени от этой величины будет равна:

$$\frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} = \sum g(i) \left[\frac{\partial c_m^{(i)*}}{\partial t} c_n^{(i)} + c_m^{(i)*} \frac{\partial c_n^{(i)}}{\partial t} \right]. \quad (2-52)$$

Дальнейшим шагом является определение производной $\partial c_n^{(i)}/\partial t$. Для этого используем уравнение Шредингера

$$\hat{H}\Psi^{(i)} = i\hbar \frac{\partial \Psi^{(i)}}{\partial t}. \quad (2-53)$$

Разложим $\Psi^{(i)}$ в ряд по собственным функциям $\psi_n(q)$ оператора \hat{H} :

$$\Psi^{(i)} = \sum_n c_n^{(i)} \psi_n(q).$$

Подставляя это разложение в уравнение (2-53), умножая обе части его на функцию ψ_m^* и интегрируя по всему пространству, получаем:

$$i\hbar \frac{\partial c_m^{(i)}}{\partial t} = \sum_n H_{mn} c_n^{(i)},$$

где

$$H_{mn} = \int \psi_m^* \hat{H} \psi_n dV.$$

Используя этот результат, а также выражение (2-52) с учетом эрмитовости матриц ($H_{mi} = H_{im}^*$), находим:

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} = \sum_i (H_{mi} \rho_{in} - \rho_{mi} H_{in}).$$

Опуская индексы, можно написать для матрицы (а следовательно, и для каждого матричного элемента) следующее уравнение:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = (H\rho - \rho H)$$

или

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho], \quad (2-54)$$

где $[H, \rho] = \frac{1}{i\hbar} (H, \rho)$ — квантовые скобки Пуассона.

Таким образом, зная для начального момента времени ($t=0$) матрицу плотности, можно, используя уравнения (2-54), вычислить ее значение для любого другого момента времени.

Если состояние системы описывается одной из собственных функций ψ_n , то выражения резко упрощаются. В этом случае матричные элементы в соответствии со стационарным уравнением Шредингера будут иметь следующий вид:

$$H_{mn} = E_n \delta_{mn},$$

где

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{при } m = n; \\ 0 & \text{при } m \neq n \end{cases}$$

и E_n — собственные значения оператора. Используя это выражение в уравнениях (2-54), получаем следующий результат:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = (E_m - E_n) \rho_{mn}(t).$$

Из этого элементарного уравнения легко может быть найден закон изменения во времени матричного элемента:

$$\rho_{mn}(t) = \rho_{mn}(0) e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) t},$$

где $\rho_{mn}(0)$ — матричный элемент в момент времени $t=0$.

ГЛАВА ТРЕТЬЯ

ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

3-1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ЗАДАЧИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛЯ С ВЕЩЕСТВОМ

Атом во внешнем поле. В предыдущей главе, посвященной основам квантовой механики, атомы вещества рассматривались как изолированные квантовые системы, процессы внутри которых обуславливались лишь внутренними силами. Это положение нашло свое отражение при решении, например, задачи об атоме водорода, где в выражении для оператора энергии была учтена энергия, связанная лишь с внутренними силами, действующими между электроном и ядром.

В этом случае энергетические уровни, определяемые главным квантовым числом n , оказываются максимально вырожденными. В более сложных атомах вырождение уровней благодаря внутренним эффектам Зеемана и Штарка частично снимается, что ведет к образованию мультиплетной структуры спектра. В целях упрощения условий для анализа тех состояний атомов, которые наступают при взаимодействии их с внешними полями, будем считать расщепления уровней за счет внутренних взаимодействий частиц отсутствующими.

Предположим теперь, что атом помещен в постоянное электрическое или магнитное поле. Мы не будем интересоваться переходными процессами, связанными с внезапным появлением этого поля, а также и с тем, что произойдет с атомом в момент исчезновения поля. Таким образом, речь пойдет лишь о тех новых стационарных состояниях, которые будет приобретать атом

в результате длительного пребывания в не изменяющемся во времени поле. Очевидно, что взаимодействие внутренних электрических (или магнитных) моментов атома с внешним полем следует рассматривать как возмущение, которое вызовет перестройку структуры энергетических уровней атома. Этот процесс сводится в основном к расщеплению энергетических уровней на ряд подуровней. При этом происходит частичное или полное снятие их вырождения.

Описание получившихся таким образом новых стационарных состояний может быть осуществлено с помощью известных уже методов волновой или матричной механики. При этом необходимо будет учесть те изменения, которые следует внести в выражение для гамильтониана системы в виде дополнительных членов, обусловленных наличием энергии взаимодействия.

Решение подобных задач осуществимо тем легче и тем точнее, чем меньше величина этих дополнительных членов по сравнению с основными. Физически это отвечает условию малости энергии взаимодействия по сравнению с полной энергией атома.

Как видно, и в этих случаях атом по-прежнему можно рассматривать как изолированную от внешней среды систему, которая способна сколь угодно долго пребывать в том или ином стационарном состоянии. Очевидно, что такое предположение является неточным и приемлемо лишь постольку, поскольку оно дает возможность с допустимой погрешностью определить потенциально возможные энергетические состояния атома, обусловленные лишь «внутренними» причинами, включая в последние и внешнее постоянное поле, в котором находится данный атом, однако без учета взаимодействия его с полем вакуума.

Естественно, что реальная картина будет более сложной. Первым и весьма существенным приближением к ней является учет того обстоятельства, что все без исключения материальные тела находятся в непрерывном взаимодействии с вечно окружающими их электромагнитными полями. Это взаимодействие выражается в непрерывном обмене энергией между веществом и полем. Этот экспериментально установленный факт, открытие которого относится еще к концу прошлого столетия, послужил поводом к ряду исследований, завершившихся таким фундаментальным результатом, как

создание квантовой физики. Дальнейшие исследования привели к установлению ряда важных закономерностей, из которых для нас особый интерес представляют следующие.

Если температура тела сохраняет некоторое постоянное значение, то между ним и окружающим тело пространством наступает состояние динамического равновесия, при котором поглощаемая и излучаемая веществом энергии в единицу времени становятся равными друг другу. Такое состояние, называемое тепловым (или термодинамическим) равновесием, характеризуется, как известно, тремя составляющими — спонтанным излучением, поглощением и вынужденным излучением. Эти три составляющие уже фигурировали у нас ранее в известных уравнениях Эйнштейна (см. § 1-2 гл. 1). Количественное распределение частиц по энергетическим уровням подчинено закону Больцмана. Согласно этому закону число частиц уменьшается с увеличением уровня по экспоненциальному закону. Состояние теплового равновесия является устойчивым (стационарным).

Полуклассическое рассмотрение. Рассмотрение указанных ранее вопросов является делом более сложным, чем воздействие на атом постоянных полей. Однако благодаря теории квантового излучения, которую предложил в свое время Эйнштейн, задача может быть существенно упрощена. Согласно этой теории атомы вещества можно представить в виде некоторого дискретного набора квантовых осцилляторов (о свойствах таких осцилляторов будет сказано ниже), каждый из которых обладает определенной частотой собственных колебаний. Поле считают при этом классическим, представляющим собой волновой процесс со сплошным спектром, практически занимающим неограниченный диапазон частот, плотность энергии по которому распределяется в соответствии с планковским законом. Очевидно, что энергетический обмен между осцилляторами вещества и полем происходит на тех частотах, для которых электрические моменты атомов отличны от нуля. Взаимодействие магнитной составляющей поля с атомами ничтожно мало и ею обычно пренебрегают. Если электрические моменты известны, то не представляет труда вычислить коэффициенты Эйнштейна $B_{nm} = B_{mn}$, а по ним и коэффициент спонтанного излучения A_{nm} .

Тот факт, что имеется возможность достаточно просто вычислить коэффициент A_{nt} , является весьма важным обстоятельством, потому что строгое решение вопроса о спонтанном излучении возможно лишь на основе квантовой электродинамики. Вопреки утверждению квантовой механики о возможности сколь угодно длительного пребывания атома в возбужденном состоянии при отсутствии внешних воздействий электроны атома согласно принципам квантовой электродинамики находятся в непрерывном взаимодействии с полем вакуума или, иначе, с виртуальными фотонами (т. е. отсутствующими фотонами, но потенциально могущими возникнуть под влиянием возбуждения). Кроме того, неравномерно движущийся электрон, даже с классической точки зрения, создает поле, оказывающее тормозящее воздействие на электрон (реакция поля). Квантовая механика ни этого поля, ни, естественно, его реакции на электрон не учитывает.

Перейдем теперь к последнему общему вопросу, представляющему непосредственный интерес для квантовой электроники. Он касается воздействия на атомы вещества достаточно мощных переменных полей, в результате чего создаются неравновесные состояния атома (состояния с инверсией населенностей уровней). Известно, что неравновесные состояния являются неустойчивыми. Их возврат в исходное состояние (в состояние теплового равновесия) сопровождается рядом процессов, имеющих вероятностный характер, а именно релаксацией, спонтанным излучением, а при наличии соответствующего по частоте квантовому переходу внешнего поля и вынужденным излучением.

В этих случаях задача, являясь нестационарной, формулируется в следующем виде: предположим, что частица находится на определенном энергетическом уровне. Какова вероятность того, что по прошествии t секунд (или в единицу времени) эта частица перейдет на другой уровень — либо на высший (с поглощением энергии), либо на низший (с излучением энергии) — при условии, что частица находится в течение некоторого определенного времени во взаимодействии с внешним полем? При этом считается, что поле и время взаимодействия известны.

Такая задача в квантовой электронике является центральной.

Следует заметить, что описанная выше проблема перерастает рамки нерелятивистской квантовой механики, затрагивая вопросы, непосредственно относящиеся к квантовой электродинамике. Действительно, процессы взаимодействия поля излучения с веществом, строго говоря, следует рассматривать как взаимодействие двух квантовых систем. Это означает, что надо учитывать корпускулярно-волновую природу как внутриатомных процессов, так и самого поля. Иными словами, для строгого решения рассматриваемой задачи необходимо подвергнуть квантованию электромагнитное поле. С таким процессом квантования мы ознакомимся в самых общих чертах в последнем параграфе данной главы. Однако прибегать к этому приему во многих случаях не имеет смысла. Практически часто оказывается вполне возможным ограничиться рассмотрением так называемой полуклассической задачи, при которой вещество считают квантовым ансамблем частиц, а поле — классическим объектом, описываемым с помощью понятий и уравнений классической электродинамики.

Основным аппаратом, используемым квантовой механикой для решения указанных выше задач, является метод теории возмущения, основное содержание которого, в применении к интересующим нас вопросам, будет изложено в следующем параграфе.

3-2. О МЕТОДЕ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Общие замечания. Под возмущением какой-либо системы в рассматриваемой теории понимают внешние силы, которые являются малыми по сравнению с силами, действующими внутри данной системы (например, силами, действующими в атоме между электроном и ядром). Указанные внешние силы приводят к появлению в выражении для так называемого невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 дополнительного члена \hat{H}' , называемого оператором энергии взаимодействия. При этом результирующий гамильтониан принимает вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'.$$

В силу малости возмущения результаты действия операторов \hat{H} и \hat{H}_0 будут мало отличаться друг от дру-

га. Этим обстоятельством и определяется сам метод, являющийся, по сути дела, методом последовательных приближений.

Идея метода состоит в том, что вначале решается задача с учетом лишь основных сил, т. е. в пренебрежении возмущением. При этом считают, что может быть получено точное решение. Затем в задачу вводят возмущающие силы, дающие поправку к полученному ранее точному решению. Эта поправка с каждым последующим приближением становится все меньше и меньше. Быстрота убывания этих поправок зависит от величины возмущения — чем оно меньше, тем быстрее сходится получаемая сумма решений к точному. Практически часто ограничиваются приближением лишь первого порядка.

Следует различать два типа задач. К задачам первого типа относятся те, в которых гамильтониан взаимодействия не зависит от времени. В этом случае результатом решения должен явиться ответ на вопрос о том, как изменяются квантовые уровни и состояние атома (т. е. собственные значения и собственные функции атома), помещенного в постоянное электрическое или магнитное поле.

Ко второй группе задач относятся все те, в которых возмущение зависит от времени. Эти задачи сложнее первых и мы рассмотрим лишь простейшие из них, представляющие для квантовой электроники практический интерес.

Рассмотрим общую задачу определения вероятности нахождения системы на одном из возможных для нее уровней энергии. Прежде всего напомним, каким образом возникает эта величина, исходя из волновой функции, описывающей данное состояние системы.

Если такой волновой функцией является, например, $\psi(q)$, то под q подразумевается соответствующий набор пространственных координат, и в этом случае говорят, что ψ дана в q -представлении. Для того чтобы ответить на поставленный выше вопрос, необходимо перейти от волновой функции в q -представлении к функции в E -представлении. В последнем случае аргументами ψ в случае дискретного спектра являются собственные значения $E_n^{(0)}$ оператора энергии \hat{H}_0 . Такой переход совершается, как известно, путем разложения исходной

функции в ряд по собственным функциям оператора энергии:

$$\psi(q) = \sum_n c_n \psi_n^0(q).$$

Искомые вероятностями будут квадраты модулей коэффициентов разложения c_n , т. е. $|c_n|^2$. При наличии возмущения эти вероятности становятся зависящими от времени и в этом случае следует писать: $|c_n(t)|^2$. После этих общих замечаний обратимся непосредственно к решению самой задачи.

Вероятность квантового перехода. Пусть с момента $t=0$ на систему воздействует внешняя сила. Стационарное состояние системы очевидно нарушится, а уравнение движения примет следующий вид:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + (\hat{H}_0 + \hat{H}') \psi = 0, \quad (3-1)$$

где \hat{H}' — оператор энергии возмущения.

Естественно, что стационарное решение вида $\psi e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$ уже не удовлетворяет этому уравнению. Его решение ищут в виде суперпозиции стационарных состояний, но с коэффициентами, зависящими от времени (стационарными состояниями являются известные нам собственные функции оператора \hat{H}_0):

$$\psi = \sum_i c_i(t) \psi_i^{(0)} = \sum_i c_i(t) \psi_i^{(0)} e^{i \frac{E_i}{\hbar} t}. \quad (3-2)$$

Коэффициенты разложения $c_i(t)$ являются пока что неизвестными функциями времени; $\psi_i^{(0)} = \psi_i^{(0)} e^{i \frac{E_i}{\hbar} t}$ — волновые функции, описывающие стационарные состояния невозмущенной системы.

Для определения коэффициентов $c_i(t)$ необходимо решить исходное уравнение (3-1). Это решение проводится следующим образом. Подставим в (3-1) функ-

цию ψ , представленную выражением (3-2):

$$\begin{aligned} & -i\hbar \sum_i \frac{dc_i}{dt} \psi_i^{(0)} e^{i \frac{E_i}{\hbar} t} + \sum_i c_i E_i \psi_i^{(0)} e^{i \frac{E_i}{\hbar} t} = \\ & = \hat{H}_0 \sum_i c_i \psi_i^{(0)} e^{i \frac{E_i}{\hbar} t} + \hat{H}' \sum_i c_i \psi_i^{(0)} e^{i \frac{E_i}{\hbar} t}. \end{aligned} \quad (3-3)$$

Уравнение (3-3) сводится к виду:

$$-i\hbar \sum_i \frac{dc_i}{dt} \psi_i^{(0)} e^{i \frac{E_i}{\hbar} t} = \hat{H}' \sum_i c_i \psi_i^{(0)} e^{i \frac{E_i}{\hbar} t}.$$

Далее, умножим обе части этого уравнения на $\psi_k^{(0)*} e^{-i \frac{E_k}{\hbar} t}$ и проинтегрируем по всему пространству q . Принимая во внимание ортонормированность функций $\psi_i^{(0)}$, получаем следующую систему уравнений относительно искомых коэффициентов c_i :

$$-i\hbar \frac{dc_k}{dt} = \sum_i c_i H'_{ki} e^{-i\omega_{ki}t}, \quad (3-4)$$

где $H'_{ki} = \int \psi_k^{(0)*} \hat{H}' \psi_i dq$ — матричный элемент энергии возмущения, а $\omega_{ki} = \frac{E_k - E_i}{\hbar}$ — частота квантового перехода.

Предположим, что начальными условиями являются:

$$c_i(0) = \delta_{ir} = \begin{cases} 1 & \text{при } i=r; \\ 0 & \text{при } i \neq r. \end{cases} \quad (3-5)$$

Это означает, что атом вначале находится на уровне i .

Далее задача решается методом последовательных приближений.

В качестве нулевого приближения, что соответствует отсутствию возмущения ($\hat{H}'=0$), выбирают значения коэффициентов $c_i(t)$, исходя из начальных условий, а именно:

$$c_i^{(0)}(t) = \delta_{ir}.$$

Определив таким образом $c_i^{(0)}(t)$, представляют их в правую часть уравнения (4-4), которое при этом [учитывая условие (3-5)] примет вид:

$$-i\hbar \frac{dc_k^{(1)}}{dt} = \sum_i c_i^{(0)} H'_{ki}(t) e^{-i\omega_{ki}t} = H'_{kr}(t) e^{-i\omega_{kr}t}.$$

Интегрирование этого уравнения приводит к следующему результату:

$$c_k^{(1)} = \frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{kr}(\tau) e^{-i\omega_{kr}\tau} d\tau + c_k(0). \quad (3-6)$$

Используя эту методику, можно совершенно аналогичным способом получить решение для коэффициентов $c_i(t)$ во втором приближении, в третьем и т. д.

Если решение в первом приближении дает нулевое значение коэффициента $c_i(t)$, необходимо прибегнуть к приближению более высокого порядка. Если результат получится и в этом случае нулевым или весьма близким к нему, то можно считать, что переход из состояния r в состояние k является запрещенным.

Очевидно вероятность перехода $r \rightarrow k$ определится выражением

$$|c^{(1)}_k(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t H'_{kr}(\tau) e^{-i\omega_{kr}\tau} d\tau \right|^2. \quad (3-7)$$

Это выражение справедливо для всех $r \neq k$.

Из полученного результата следует, что вероятность перехода, являясь функцией времени, зависит также от разности между уровнями, поскольку $\omega_{kr} = (E_k - E_r)/\hbar$ и от величины матричного элемента H'_{kr} . Если $H'_{kr} = 0$, то переход в данном приближении оказывается запрещенным.

3-3. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ С ПОСТОЯННЫМ ПОЛЕМ

Переход на одиночный уровень. Рассмотрим случай, когда система с момента времени $t=0$ до $t=\tau$ помещена в постоянное электрическое или магнитное поле.

Для определения коэффициента $c(t)$ обратимся к формуле (3-6):

$$c^{(1)}_k = \frac{i}{h} \int_0^{\tau} H'_{kr}(t) e^{-i\omega_{kr}t} dt + c_k(0).$$

Так как в данном случае $H'_{kr} = \text{const}$, то это выражение легко проинтегрировать и для всех значений $r \neq k$, мы получим следующий результат:

$$c^{(1)}_k(\tau) = -\frac{1}{h} H'_{kr} \frac{e^{i\omega_{kr}\tau} - 1}{\omega_{kr}}. \quad (3-8)$$

Из этого выражения следует, что вероятность перехода из любого состояния r в состояние k тем больше, чем ближе между собой уровень E_k и E_r , причем максимум будет соответствовать случаю, когда $E_k = E_r$, т. е. переходу между равными уровнями. При $E_k = E_r$ и малом значении τ вероятность перехода $E_r \rightarrow E_k$ будет пропорциональна квадрату времени. Действительно, разложим экспоненциальную функцию в ряд и ограничимся двумя первыми членами разложения:

$$e^{i\omega_{kr}\tau} = 1 + i\omega_{kr}\tau + \dots$$

Получаем:

$$|c^{(1)}_k(\tau)|^2 = \frac{1}{h^2} |H'_{kr}|^2 \tau^2.$$

Переход в группу близко расположенных уровней. Этот результат может быть распространен на другой практически важный случай, а именно когда мы имеем дело с вероятностью перехода не на один какой-либо уровень, а на целую группу уровней, расположенных весьма близко друг от друга. Эта задача имеет еще одно дополнительное практически важное значение, так как в пределе, когда эти уровни сливаются и образуют полосу, можно подсчитать полную вероятность перехода с определенного уровня на широкий уровень.

Этот предельный переход легко рассчитывается при помощи (3-8). При наличии дискретной группы близко лежащих друг от друга уровней полная вероятность

определяется следующей суммой:

$$\sum_k |c_k(t)|^2 = \sum_k \frac{2}{h^2} |H'_{kr}|^2 \frac{1 - \cos \omega_{kr} t}{\omega_{kr}^2}. \quad (3-9)$$

Если уровни практически слились в сплошную полосу, то предыдущая задача может быть решена, если ввести понятие о спектральной плотности энергии $u(E)$ и прибегнуть к предельному переходу в выражении (3-9). В этом случае число возможных состояний, лежащих в интервале от E_k до $E_k + dE_k$, будет равно $u(E_k) \Delta E_k$. Вероятность перехода W для рассматриваемого нами случая принимает следующий вид:

$$W = \frac{2}{h^2} \int_{E'}^{E''} |H'_{kr}|^2 \frac{1 - \cos \omega_{kr} t}{\omega_{kr}^2} u(E_k) dE_k;$$

здесь $E' < E_r$; $E'' > E_k$; $(E_k - E_r)^2 = \omega_{kr}^2 \cdot h^2$.

Ввиду того, что подынтегральное выражение существенно отличается от нуля лишь при $E_k \approx E_r$, т. е. в узком интервале значений E , можно считать, что в этой области величины H'_{kr} и $u(E_k)$ практически сохраняют постоянное значение.

Вынеся эти величины из-под знака интеграла, получим:

$$W = 2 |H'_{kr}|^2 u(E_k) \int_{E'}^{E''} \frac{1 - \cos \omega_{kr} t}{(E_k - E_r)^2} dE_k.$$

Вводя новую переменную $x = \frac{\omega_{kr} t}{2} = \frac{E_k - E_r}{h} t$, можно представить выражение для W в более удобном для дальнейшего анализа виде:

$$W = \frac{2t}{h} |H'_{kr}|^2 u(E_k) \int_{\frac{E' - E_k}{h} t}^{\frac{E'' - E_k}{h} t} \frac{1 - \cos 2x}{x^2} dx.$$

Рассмотрим практически важный случай, когда система находится неопределенно долго в постоянном

электрическом или магнитном поле. Принимая во внимание, что

$$\frac{1 - \cos 2x}{2} = \sin^2 x$$

и

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\sin x}{x} \right)^2 dx = \pi,$$

получаем для достаточно больших t вероятность перехода, равную

$$W = \frac{2\pi}{h} |H'_{kr}|^2 u(E_k) t.$$

Вероятность же перехода в единицу времени в единичном интервале значений энергии около уровня E_k , очевидно, будет равна:

$$w = \frac{dW}{dt} = \frac{2\pi}{h} |H'_{kr}|^2 u(E_k).$$

Расщепление уровней. При постоянной величине энергии взаимодействия возникает еще один важный эффект, непосредственно связанный с явлениями Зеемана и Штарка. По сути дела задача сводится к отысканию стационарных решений, т. е. собственных состояний оператора энергии с учетом неизменяемого во времени возмущения. В этом случае, т. е. когда оператор энергии имеет вид $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$, где $\hat{H}' = \text{const}$ и энергия взаимодействия мала по сравнению с энергией, определяемой оператором \hat{H}_0 , собственные значения оператора \hat{H} в первом приближении приобретут вид $E = E_i \pm \Delta E$, где E_i — уровень энергии невозмущенной системы, $\Delta E = H'_{kk}$, где $H'_{kk} = \int \psi_k^* \hat{H}' \psi_k dq$ — изменение этого уровня под влиянием воздействия внешней силы.

Таким образом, в первом приближении собственная функция возмущений системы соответствует собственной функции невозмущенного состояния, а сдвиг уровня энергии равен среднему значению энергии возмущения.

Если в отсутствие внешнего поля волновая функция, описывающая состояние системы, могла быть записана в виде

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t},$$

то (при наличии возмущенного поля это разложение получает следующий вид:

$$\psi' = \sum_n c_n \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n \pm \Delta E) t}.$$

Выразив экспоненциальные множители через частоту, волновые функции можно записать так:

$$\psi' = \sum_n c_n \psi_n e^{-i \omega_n (\omega_n \pm \Delta \omega) t}.$$

Такая запись позволяет провести следующую аналогию: возникающие при наложении на атом магнитного поля процессы можно уподобить модуляции, при этом роль несущей частоты играет основной уровень E_n , а роль боковых частот — расщепленные уровни $E_n \pm \Delta E$.

Так как затронутые в этом параграфе вопросы имеют для квантовой электроники большое значение, имеет смысл рассмотреть их несколько подробнее на более простом, но конкретном примере.

3.4. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМА ВОДОРОДА С ПОСТОЯННЫМ ПОЛЕМ

Атом водорода во внешнем поле. Поместим во внешнее магнитное поле атом водорода. Внешнее поле рассматривается как относительно малое возмущение. Следует отметить, что даже большая напряженность поля, достигающая сотни тысяч вольт на метр, должна считаться малым возмущением, принимая во внимание огромные значения напряженности внутриатомных электрических полей ($\sim 10^9$ в/см).

Если оставаться в рамках нерелятивистской квантовой механики, то необходимо при взаимодействии внеш-

него поля B_0 с $\bar{\mu}_l$ атомом учитывать лишь орбитальный магнитный момент электрона $\bar{\mu}_l$, который связан с механическим орбитальным моментом p_l соотношением:

$$\bar{\mu}_l = -\frac{e}{2m_a} p_l,$$

где $e/2m_a = \gamma_l$ — гиромагнитное число.

Как известно, z -я составляющая оператора механического орбитального момента равна:

$$\hat{p}_{lz} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

и, следовательно, для этой же составляющей магнитного момента можно написать:

$$\hat{\mu}_{lz} = i \frac{e\hbar}{2m_a} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Поскольку потенциальная энергия взаимодействия вектора B_0 с магнитным моментом $\bar{\mu}_l$ равна:

$$U_m = -\bar{\mu}_l B_0$$

оператор энергии взаимодействия получит в итоге следующее выражение:

$$\hat{U}_m = -i \frac{e\hbar}{2m_a} B_0 \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

а оператор полной энергии будет равен:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_a} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - i \frac{e\hbar}{2m_a} B_0 \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Собственные значения этого оператора равны:

$$E_{n, m_l} = -\frac{m_a e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} + B_0 \frac{e\hbar}{2m_a} m_l,$$

где $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$.

Из последнего выражения видно, что энергия возмущенного атома водорода зависит уже от двух квантовых чисел n и m_l , в то время как для невозмущенного атома

водорода имеется зависимость лишь от одного главного квантового числа n . Так же как и в случае постоянного магнитного поля, взаимодействие электрического момента атома с внешним полем создает дополнительную энергию — энергию взаимодействия:

$$U_e = -\mathbf{p}\mathcal{E}_0 = -p_z\mathcal{E}_0$$

(полагаем, что вектор \mathcal{E}_0 направлен вдоль оси Oz). Здесь $p_z = ez$ — проекция дипольного электрического момента электрона на ось Oz . При этом оператор энергии принимает вид:

$$\hat{H} = -\left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + U + ez\mathcal{E}_0\right).$$

Учет спина электрона. Известно, что описание состояний атомов с помощью лишь трех квантовых чисел n , l , m_l является неполным, так как при этом не учитываются собственные движения электронов. Эти движения происходят независимо ни от координат, ни от импульсов электронов и обусловлены лишь внутренними свойствами самого электрона. Такие свойства, как известно, описываются с помощью понятия спина и соответственно квантовых спиновых чисел. Таким образом, с внешним полем взаимодействует полный магнитный момент электрона, складывающийся из его орбитального и спинового моментов:

$$\bar{\mu}_j = \bar{\mu}_l + \bar{\mu}_s.$$

Полным механическим моментом электрона является также сумма двух моментов — орбитального и спинового:

$$\mathbf{p}_j = \mathbf{p}_l + \mathbf{p}_s.$$

Проекция этого момента на произвольно выбранное направление определяется выражением

$$p_{jz} = (m_l + m_s)\hbar,$$

где

$$m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l; \quad m_s = \pm \frac{1}{2}.$$

Между механическим и магнитным спиновыми моментами и их z составляющими существует соотношение

$$\bar{\mu}_s = -\frac{e}{m_s} p_s \text{ и } \bar{\mu}_{sz} = +\frac{eh}{2m_s}.$$

Следовательно, полный магнитный момент будет равен:

$$\bar{\mu}_j = \bar{\mu}_l + \bar{\mu}_s = -\frac{e}{2m_s} (p_l + 2p_s)$$

и соответственно его z -я проекция

$$\mu_{jz} = -\frac{eh}{2m_s} (m_l + 2m_s).$$

Напомним, что коэффициент 2 при m_s берется потому, что гироманнитное число для спиновых моментов в 2 раза больше, чем для орбитальных:

$$\gamma_s = 2\gamma_l, \text{ где } \gamma_l = \frac{eh}{2m_s}.$$

На основе изложенного выше не представляет труда написать выражение, которым описывается расщепление энергетических уровней, если принять во внимание спиновый момент электрона. Действительно, с учетом лишь орбитального момента формула для уровней имела вид:

$$E_n = E_n^{(0)} + \frac{ehB_0}{2m_s} m_l,$$

где $E_n^{(0)}$ — уровень энергии невозмущенного атома.

По аналогии можем написать выражение для энергетических уровней спинового момента:

$$E_n = E_n^{(0)} + \frac{ehB_0}{2m_s} (m_l + 2m_s).$$

В заключение заметим, что получить выражение для оператора энергии, собственные значения которого равны приведенным ранее величинам, можно лишь при условии, если известен оператор спина. Спин является понятием релятивистским, и поэтому в аппарате используемой нами теории он отсутствует. Однако хотя бы чисто постулативное введение спина в нерелятивист-

скую квантовую механику было необходимым, так как это сделало ее более полной теорией и существенно расширило круг решаемых ею задач.

Уравнение Паули. Состояние атома, описываемое каждой собственной функцией, характеризуется, как известно, четырьмя квантовыми числами n, l, m_l, m_s . Поэтому мы можем условно записать эту функцию в виде

$$\psi = \psi_{n, l, m_l, m_s}(q).$$

Ввиду независимости орбитальных и спиновых моментов каждую собственную функцию можно представить в виде произведения двух функций:

$$\psi = \psi_{n, l, m_l}(q) \psi_s(q).$$

Очевидно, что оператор энергии возмущения состоит из двух слагаемых — одно из них связано с главным и орбитальным числами n, l, m_l , другое — со спиновым числом m_s . Так как каждый из этих операторов действует лишь на свою функцию, то для оператора проекции спина на ось Oz будет справедливо следующее уравнение:

$$\hat{S}_z \psi_s(q) = \pm \frac{\hbar}{2} \psi_s(q).$$

Обычно вместо оператора \hat{S}_z вводят другой, обозначаемый через $\hat{\sigma}_z$ и связанный с \hat{S}_z соотношением:

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z.$$

Уравнение при этом примет вид:

$$\hat{\sigma}_z \psi_s(q) = \pm \psi_s(q).$$

Отсюда следует, что операторы $\hat{\sigma}_z$ являются постоянными величинами, которые могут принимать лишь два значения $+1$ и -1 в соответствии с двумя возможными ориентациями спина по отношению к полю — параллельно или антипараллельно ему.

На основе изложенного мы можем оператор энергии возмущения записать в виде

$$\hat{H}' = -\frac{eh}{2m_0} \left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \hat{\sigma}_z \right) B_0$$

или

$$\hat{H}' = -\frac{eh}{2m_0} \left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} \mp 1 \right) B_0.$$

Таким образом, для атома водорода, находящегося в постоянном магнитном поле, будет справедливо уравнение:

$$\begin{aligned} & -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi + U\Psi - \\ & - \frac{eh}{2m_0} B_0 \left(i \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \mp \Psi \right) = 0, \end{aligned}$$

называемое уравнением Паули.

В соответствии с двумя значениями оператора $\hat{\sigma}_z$ образуются две группы расщепленных уровней:

$$E'_{n, l, m_l, m_s} = E_n^{(0)} + \frac{ehB_0}{2m_0} (m_l + 1) \text{ при } m_s = +\frac{h}{2}$$

и

$$E''_{n, l, m_l, m_s} = E_n^{(0)} + \frac{ehB_0}{2m_0} (m_l - 1) \text{ при } m_s = -\frac{h}{2}.$$

Замечания об эффекте Штарка. Сделаем несколько замечаний о расщеплении энергетических уровней атома, находящегося в постоянном электрическом поле (эффект Штарка). Анализ этого явления значительно сложнее, чем эффекта Зеемана, и поэтому мы ограничимся изложением лишь самых общих свойств данного явления.

Прежде всего необходимо отметить, что эффект Штарка подразумевает наличие в атомах электрического момента; это может быть дипольный момент или момент более высокого порядка. Эти моменты могут создаваться, особенно в сложных атомах, за счет внутренних взаимодействий между частицами, а также возникать за счет внешнего поля (так называемые индуцированные моменты).

Происходящее под влиянием внешнего электрического поля расщепление уровней в атоме будет различным в зависимости от вида атома; в простых атомах (например, в атоме водорода) это расщепление пропорционально первой степени напряженности электрического поля, в более сложных оно пропорционально квадрату этой величины. При очень сильных полях может появиться дополнительное расщепление, пропорциональное напряженности в еще более высокой степени.

Расщепленных линий в некоторых случаях может быть настолько много и они располагаются так близко друг к другу, что образуют уровень, имеющий определенную ширину.

Решение уравнения Шредингера для атома водорода в электрическом поле. Для атома водорода справедливо следующее уравнение Шредингера:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - ez\mathcal{E}_0 \right) \psi = 0.$$

Решение этого уравнения, проведенное Шредингером, достаточно сложно. Однако имеется более простой, графо-аналитический метод решения этой задачи, предложенный Бором, приводящий в конечном счете к тому же результату, что и решение Шредингера.

Для ознакомления с основными результатами, полученными Бором, мы воспользуемся изложением этих вопросов, данным Хиппелем [Л. 36].

Движение электрона по эллиптическим орбитам происходит с неравномерной скоростью. Если сопоставлять траекторию электрона с электронным облаком, то плотность последнего должна быть различной на различных участках траектории. Эта неравномерность в распределении заряда приводит к тому, что каждая эллиптическая орбита может быть охарактеризована средним электрическим дипольным моментом

$$\mathbf{p} = e\mathbf{d},$$

где \mathbf{d} — вектор плеча момента вдоль большой полуоси эллипса.

В отсутствие внешнего электрического поля существование указанных средних дипольных моментов никак не отражается на состоянии атома, так как «орбиты» электрона могут иметь любые ориентации и поэтому

результатирующий эффект сводится к нулю. При наличии же внешнего поля вращающийся электрон превращается в гироскопическую систему. В таком гироскопе ось углового момента перпендикулярна электрическому дипольному моменту. Возникающая при этом прецессия имеет круговую частоту, равную

$$\omega_e = \frac{6\pi\epsilon_0 h}{m_e e} n \mathcal{E}_0 \approx 1,93 \cdot 10^4 n \mathcal{E}_0,$$

где n — главное квантовое число;

\mathcal{E}_0 — абсолютное значение напряженности электрического поля.

Прецессионное движение вносит добавочное слагаемое в энергию атома. Эта добавочная энергия квантуется:

$$\Delta E_n = n_e \omega_e \hbar,$$

где n_e — так называемое «электрическое квантовое число».

Далее Бор связывает это новое квантовое число с радиальным квантовым числом n_r ($n = n_r + n_\varphi = n_r + l + 1$) через два дополнительных целых числа n_a и n_b :

$$n_r = n_a + n_b;$$

$$n_e = n_a - n_b.$$

С введением чисел n_a и n_b полная энергия электрона в состоянии, характеризующемся главным квантовым числом n , получит следующий вид:

$$E_n = E_n^{(0)} + \frac{6\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e} n (n_a - n_b) \mathcal{E}_0.$$

При $n_a = n_b$ средний электрический дипольный момент ориентирован под прямым углом по отношению к направлению поля и поэтому расщепления уровня не происходит. При $n_a > n_b$ центр распределения электронного заряда смещается в сторону направления поля, а при $n_a < n_b$ — в сторону, обратную направлению поля.

3-5. КЛАССИЧЕСКИЙ ЛИНЕЙНЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Характер спектров излучения атомов показывает, что как атомы, так и более сложные их образования — молекулы могут явиться при определенных условиях

источниками как некогерентных, так и когерентных излучений. Подробное рассмотрение этого основного вопроса квантовой электроники целесообразно начать с напоминания основных свойств классического линейного осциллятора, так как многие понятия и соотношения, связанные с таким излучателем, оказываются весьма полезными и при трактовке процесса дипольного излучения с позиций квантовой теории.

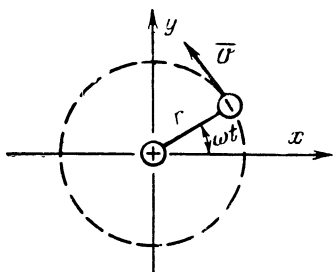


Рис. 3-1. Круговая орбита электрона атома водорода.

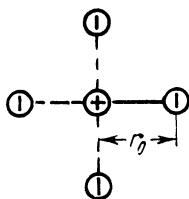


Рис. 3-2. Система двух электрических диполей со сдвигом по фазе на угол $\pi/2$.

Атомный электрон как осциллирующий диполь.

В основе классического рассмотрения лежит метод определения интенсивности излучения атома, представляющего собой осциллирующий электрический диполь. Для упрощения задачи будем считать, что электрон движется по круговой орбите относительно положительно заряженного ядра, помещенного в центре декартовой системы координат (рис. 3-1). Такое движение эквивалентно гармоническому (с одним и тем же периодом) движению двух электронов по взаимно перпендикулярным направлениям со сдвигом по фазе на $\pi/2$ (рис. 3-2):

$$x = r_0 \cos \omega_0 t;$$

$$y = r_0 \sin \omega_0 t.$$

Дипольные моменты таких излучателей будут равны:

$$p_x = -er_0 \cos \omega_0 t;$$

$$p_y = -er_0 \sin \omega_0 t.$$

Таким образом, вращающийся по окружности электрон можно рассматривать как два линейных осциллятора, частота излучения которых равна угловой скорости

обращения электрона по орбите ω_0 . Для простоты ограничимся рассмотрением лишь одного диполя.

В соответствии с рис. 3-3 напишем следующее известное уравнение для колеблющейся около некоторого центра ($r=0$) материальной точки (электрона), обладающей массой m_3 и коэффициентом упругости k :

$$m_3 \frac{d^2 r}{dt^2} + kr = 0.$$

Решение этого уравнения для равной нулю начальной фазы имеет вид:

$$r = r_0 \cos \omega_0 t; \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m_3}}.$$

Полный запас энергии равен:

$$E_0 = \frac{m_3 \omega_0^2 r_0^2}{2}.$$

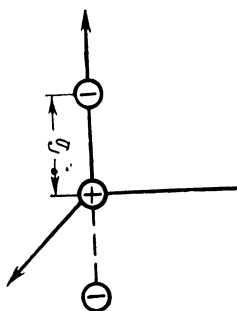


Рис. 3-3. Классический атомный диполь.

Мощность излучения диполя. Колеблющийся электрон непрерывно излучает энергию, и запас полной энергии вследствие этого убывает. По аналогии с обычным электрическим диполем средняя за период мощность излучения диполя, находящегося в вакууме, может быть выражена формулой

$$-\frac{dE}{dt} = I = \frac{1}{12\pi\epsilon_0} \frac{e^2 \omega_0^4 r_m^2}{c^3}. \quad (3-10)$$

В этой формуле величина амплитуды r_m — убывающая функция времени $r_m = r_m(t)$. Следующим шагом как раз и является нахождение закона уменьшения во времени этой величины. Очевидно, что с уменьшением r_m убывает и значение полной энергии $E = E(t)$, которая при $t=0$ равна E_0 .

Для любого момента времени

$$E = \frac{m_3 \omega_0^2 r_m^2}{2}, \quad (3-11)$$

откуда

$$\omega_0^2 r_m^2 = \frac{2E}{m_3}.$$

Тогда для средней мощности излучения можно написать:

$$-\frac{dE}{dt} = \frac{1}{6\pi\epsilon_0} \frac{e^2\omega_0^2}{m_3c^3} E.$$

Обозначая

$$\gamma = \frac{1}{6\pi\epsilon_0} \frac{e^2\omega_0^2}{m_3c^3},$$

получаем уравнение для энергии излучателя:

$$\frac{dE}{dt} + \gamma E = 0.$$

Решением этого уравнения является:

$$E = E_0 e^{-\gamma t}, \text{ где } E_0 = \frac{m_3\omega_0^2 r_0^2}{2}. \quad (3-12)$$

Сопоставляя (3-11) с (3-12), можно написать:

$$r_m = r_0 e^{-\frac{\gamma}{2} t}.$$

Систему электрон+поле в силу закона сохранения импульса следует считать консервативной. Поэтому энергия, которая теряется электроном, полностью передается полю. Такую передачу энергии можно рассматривать как реакцию поля на электрон. Эта реакция может быть выражена некоторой тормозящей электрон силой F . С учетом потерь на излучение уравнение для атомного диполя должно быть записано в виде

$$m_3 \frac{d^2 r}{dt^2} + kr = F$$

или

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{m_3 \left(\frac{dr}{dt} \right)^2}{2} + \frac{kr^2}{2} \right] = F \frac{dr}{dt}.$$

Левая часть этого уравнения описывает мощность излучения, а правая — работу тормозящей силы. Учиты-

вая выражение для мощности излучения (4-10), можно написать:

$$F \frac{dr}{dt} = - \frac{1}{12\pi\epsilon_0} \frac{e^2 \omega_0^4 r^2}{c^3}.$$

Так как $r = r_0 e^{-\frac{\gamma}{2} t} \cos \omega_0 t$, то, полагая $\gamma \ll \omega_0$, находим

$$\frac{dr}{dt} = - \omega_0 r_0 e^{-\frac{\gamma}{2} t} \sin \omega_0 t;$$

$$\frac{d^2 r}{dt^2} = - \omega_0^2 r_0 e^{-\frac{\gamma}{2} t} \cos \omega_0 t,$$

откуда

$$\left(\frac{d^2 r}{dt^2} \right)^2 = \omega_0^4 r_0^2 e^{-\gamma t} \cos^2 \omega_0 t.$$

Усредняя эту величину за период, получаем:

$$\overline{\left(\frac{d^2 r}{dt^2} \right)^2} = \frac{\omega_0^4 r_0^2 e^{-\gamma t}}{2} = \frac{\omega_0^4 r_m^2}{2}. \quad (3-13)$$

Таким образом, можно написать:

$$F \frac{dr}{dt} = - I = - \frac{1}{6\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{c^3} \overline{\left(\frac{d^2 r}{dt^2} \right)^2},$$

или, учитывая (3-13),

$$I = \frac{\omega_0^4 p^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} = \frac{\omega_0^4 p_0^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} e^{-\gamma t},$$

где $p = p_0 e^{-\frac{\gamma}{2} t}$, а $p_0 = e r_0$ — абсолютное значение электрического момента при $t=0$.

Обозначая

$$I_0 = \frac{\omega_0^4 p_0^2}{6\pi\epsilon_0 c^3},$$

получаем выражение для средней за период мощности атомного диполя:

$$I = I_0 e^{-\gamma t} = I_0 e^{-t/\tau}.$$

Это выражение полностью совпадает с выражением для спонтанного излучения, в котором

$$\gamma = \frac{1}{\tau} = A_{21}.$$

Такой результат позволяет продолжить анализ полученного выражения для классического осциллятора в отношении спектральной структуры его излучения. Картина такого спектра будет полностью справедлива и для спонтанного излучения, но, очевидно, сущность самого физического явления будет несколько иной, чем в случае излучения классического осциллятора.

Из предыдущего изложения легко установить, что мгновенная мощность излучения атомного диполя с точностью до постоянного множителя равна $r^2(t)$, где

$$r_k(t) = r_0 e^{-\frac{\gamma}{2}t} \cos \omega_0 t.$$

Спектр излучения. Для получения спектра излучения необходимо представить $r(t)$ в виде интеграла Фурье:

$$r(t) = \int_{-\infty}^{\infty} r(\omega) e^{i\omega t} d\omega,$$

где

$$r(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} r(t) e^{-i\omega t} dt. \quad (3-14)$$

Представим $r(t)$ в виде

$$r(t) = \frac{r_0}{2} e^{-\frac{\gamma}{2}t} (e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t})$$

и подставим это выражение в (3-14).

Произведя интегрирование и отбросив малые члены, получим:

$$r(\omega) = \frac{r_0}{2\pi} \frac{1}{i(\omega_0 - \omega) + \frac{\gamma}{2}}.$$

Интересующая нас величина $|r(\omega)|^2 = r^*(\omega)r(\omega)$ равна

$$|r(\omega)|^2 = \frac{r_0^2}{4\pi^2} \frac{1}{(\omega_0 - \omega)^2 + \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2},$$

где ω — мгновенное значение частоты.

Зависимость

$$g(\omega) = \frac{A}{(\omega_0 - \omega)^2 + \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2},$$

где $A = (2/\gamma)^2$ является нормировочным множителем, называется кривой Лоренца (рис. 3-4) и характеризует

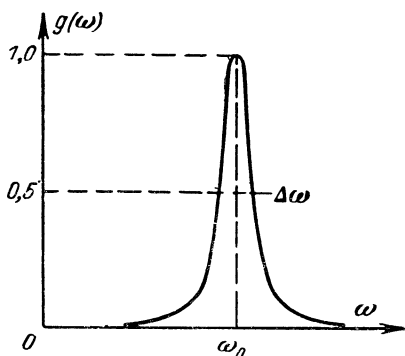


Рис. 3-4. Нормированная кривая Лоренца.

распределение энергии по частотному спектру. Как видно из этого выражения, максимум $g(\omega)$ наступает при частоте $\omega = \omega_0$. По обе стороны от ω_0 спектральная плотность убывает и тем резче, чем больше коэффициент затухания γ . На расстоянии $\omega_0 - \omega = \gamma/2$ эта плотность уменьшается в 2 раза. Величина $2(\omega_0 - \omega) = \Delta\omega$ и представляет собой естественную ширину спектральной линии. Величина $1/\gamma = \tau$ называется временем релаксации. Из последнего равенства непосредственно вытекает фундаментное соотношение спектрального анализа:

$$\Delta\omega\tau = \Delta\omega\Delta t \approx 1,$$

которое получило в квантовой теории свое специфическое истолкование в виде соотношения неопределенностей.

Для характеристики естественной ширины спектральной линии более удобно перейти от частоты к длине волны. Учитывая, что

$$\Delta\omega = \frac{1}{2\pi} \frac{c}{\lambda^2} \Delta\lambda,$$

и используя выражение для γ , приходим к следующей формуле:

$$2\Delta\lambda = \frac{4\pi c^2}{3m_0 c^2} = \text{const.}$$

Подставляя в эту формулу известные значения всех входящих в нее величин, получаем:

$$2\Delta\lambda \approx 1,2 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}.$$

Естественная ширина спектральной линии (называемая также радиационной шириной), выраженная в длинах волн, является, как видно из приведенного выражения, универсальной постоянной, не зависящей от излучающего вещества.

3-6. КВАНТОВЫЙ ЛИНЕЙНЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Ввиду того, что линейный осциллятор играет в квантовой теории излучения исключительно большую роль, считаем полезным привести решение этой задачи как методами волновой механики (с помощью уравнения Шредингера), так и методами матричной механики. Целесообразность такого двойного решения оправдывается тем обстоятельством, что в литературе по квантовой электронике используется как один, так и другой метод в зависимости от характера решаемой задачи.

Метод волновой механики. Гармонический осциллятор в простейшем виде представляет собой материальную точку массы m , совершающую колебание по прямой (например, вдоль оси x) под действием силы

$$F = -m\omega_0^2 x,$$

где

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

является собственной частотой осциллятора, а k — коэффициентом упругости.

Потенциальная энергия может быть записана в виде

$$U = \frac{1}{2} \omega_0^2 m x^2.$$

В этом случае уравнение Шредингера принимает вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar} \left(E - \frac{1}{2} \omega_0^2 m x^2 \right) \psi = 0.$$

Введем обозначения:

$$\alpha = \frac{2m}{\hbar^2} E; \quad \beta = \frac{m\omega_0}{\hbar},$$

после чего написанное выше уравнение примет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\alpha - \beta^2 x^2) \psi = 0; \quad (3-15)$$

при $x \rightarrow \infty$ имеем $\alpha \ll \beta x^2$, в результате уравнение упрощается:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \beta^2 x^2 \psi = 0.$$

Этому упрощенному уравнению удовлетворяет решение вида

$$\psi = e^{\pm \frac{\beta}{2} x^2}.$$

В силу того, что функция ψ должна быть конечной во всей области переменной x от 0 до ∞ , физический смысл имеет лишь решение

$$\psi = e^{-\frac{\beta}{2} x^2}.$$

Точное решение уравнения (4-15) записывают в виде произведения двух функций:

$$\psi = u v^{-\frac{\beta}{2} x^2},$$

где

$$v = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i.$$

Подставляя это решение в уравнение (4-15), получаем:

$$\frac{d^2 v}{dx^2} - 2\beta x \frac{dv}{dx} + (\alpha - \beta) v = 0.$$

Введем безразмерную переменную $\xi = x \sqrt{\beta}$, тогда предыдущее уравнение переписется в следующем виде:

$$\frac{d^2 v}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dv}{d\xi} + \left(\frac{\alpha}{\beta} - 1 \right) v = 0,$$

где

$$v = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i = \sum_{i=0}^{\infty} a'_i \xi^i; \quad a'_i = \frac{a_i}{\sqrt{\beta}}.$$

Используя эти выражения, придем к бесконечной системе уравнений такого вида:

$$\sum_{i=0}^{\infty} \left[i(i-1) a'_i \xi^{i-2} - 2i a'_i \xi^i + \left(\frac{\alpha}{\beta} - 1 \right) a'_i \xi^i \right] = 0. \quad (3-16)$$

Уравнения должны быть справедливы для любых ξ , не равных нулю.

Для того чтобы под знаком суммы выделить общий множитель ξ^i , необходимо в первом слагаемом вместо индекса i положить индекс $i+2$, тогда из (3-16) получим:

$$(i+2)(i+1) a'_{i+2} + \left(\frac{\alpha}{\beta} - 1 - 2i \right) a'_i = 0.$$

На этом этапе возникает известный уже из решения задачи об атоме водорода вопрос о числе членов ряда, которым необходимо ограничиться, чтобы удовлетворить условию конечности функции ψ во всей области интегрирования. Действительно, при $x \rightarrow \infty$ и, следовательно, при $\xi \rightarrow \infty$ функция ψ также стремится к бесконеч-

ности, несмотря на наличие экспоненциального множителя $e^{-\xi^2/2}$:

$$\psi = e^{-\xi^2/2} \sum_{i=0}^{\infty} a'_i \xi^i \rightarrow \infty.$$

Поэтому для получения конечных решений для ψ необходимо оборвать ряд на некотором n -м члене. Это приводит к рекуррентной формуле для коэффициентов ряда:

$$a'_{i+2} = \frac{2i+1 - \frac{\alpha}{\beta}}{(i+2)(i+1)} a'_i. \quad (3-17)$$

Если мы хотим, чтобы коэффициенты a'_{i+2} , a'_{i+4} и т. д. были равны нулю, необходимо потребовать, чтобы числитель выражения (3-17) обращался в нуль. Полагая, что при этом $i=n$, получаем:

$$2n+1 - \frac{\alpha}{\beta} = 0,$$

откуда

$$\frac{\alpha}{\beta} = 2n+1,$$

где n — номер члена ряда, на котором он обрывается.

Так как

$$\alpha = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad \beta = \frac{m\omega_0}{\hbar},$$

следовательно,

$$\frac{\alpha}{\beta} = \frac{2E}{\hbar\omega} = 2n+1$$

и

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad (3-18)$$

где n — главное квантовое число.

Обратимся к полученному выше выражению для волновой функции:

$$\psi_i = e^{-\xi^2/2} \sum_{i=0}^{\infty} a'_i \xi^i.$$

Найдем интересующую нас величину $\psi^* \psi_i = |\psi_i|^2$ для случаев

1) $i=n=0$ и 2) $i=n=1$.

При $n=0$, учитывая, что $\xi = x \sqrt{\beta}$, имеем:

$$\psi_0 = a_0 e^{-\beta x^2/2}; \quad |\psi_0|^2 = a_0^2 e^{-\beta x^2}.$$

При $n=1$ получим:

$$\psi_1 = (a_0 + a_1 x) e^{-\beta x^2/2}; \quad |\psi_1|^2 = (a_0 + a_1 x)^2 e^{-\beta x^2}.$$

Полученные выражения для $|\psi_0|^2$ и $|\psi_1|^2$, являющиеся, как известно, плотностью вероятности положения частицы, изображены на рис. 3-5 и 3-6.



Рис. 3-5. Кривая (ψ_0) для гармонического осциллятора.

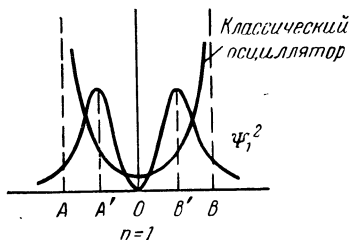


Рис. 3-6. Кривая (ψ_1) для гармонического осциллятора.

На этих рисунках нанесены кривые, соответствующие классическому осциллятору. Сравнение кривых заставляет обратить внимание на два обстоятельства. Первое из них относится к случаю $n=0$. С точки зрения классической теории никаких колебаний осциллятора в этом случае быть не может. Осциллятор находится в статическом устойчивом состоянии и положение частицы с вероятностью, равной единице, находится в точке $x=x_0$ (см. рис. 3-5). С точки зрения квантовой механики точке x_0 соответствует лишь наибольшая вероятность, но вследствие наличия нулевой энергии, о которой будет подробно сказано в конце данной главы, вероятность других значений x также отлична от нуля.

Метод матричной механики. Выражение для энергии классического осциллятора будет иметь, как известно, следующий вид:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2} = H.$$

Уравнения Гамильтона для этого случая примут вид:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}; \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -kq.$$

Исключая из первого уравнения p , приходим к известному уравнению осциллятора

$$\ddot{q} + \omega_0^2 q = 0,$$

где

$$\omega_0^2 = \frac{k}{m}.$$

Для квантового осциллятора будет справедливо точно такое же уравнение, в котором, однако, под \dot{q} и \ddot{q} следует понимать матрицы переменной q и его второй производной, причем должно быть наложено дополнительное условие:

$$pq - qp = -i\hbar,$$

где p — матрица импульса.

Обычно от уравнения для матриц переходят к уравнению для матричных элементов, которые, очевидно, удовлетворяют тому же уравнению, а именно:

$$q_{mn}''(t) + \omega_0^2 q_{mn} = 0.$$

Решение этого уравнения известно:

$$q_{mn}(t) = q_{mn}(0) e^{i\omega_{nm}t},$$

откуда

$$(\omega_0^2 - \omega_{nm}^2) q_{mn} = 0.$$

Следовательно, если $q_{mn} \neq 0$, то

$$\omega_{nm} = \pm \omega_0. \quad (3-19)$$

Знак у ω_0 означает либо переход с более высокого энергетического уровня (n) на более низкий ($n-1$), что соответствует излучению кванта энергии $\hbar\omega_0$, или, наоборот, переходу с нижнего уровня ($n-1$) на более высокий (n), что соответствует поглощению осциллятором кванта энергии.

Итак, можно написать:

$$q_{mn}=0 \text{ при } m \neq n \pm 1;$$

$$q_{mn} \neq 0 \text{ при } m = n \pm 1.$$

Следовательно, равенство (3-19) можно переписать в следующем виде:

$$\omega_{n-1,n} = \omega_0;$$

$$\omega_{n,n-1} = -\omega_0.$$

Аналогичным образом можно записать выражения для матричных элементов импульсов. Поскольку

$$\dot{q}_{mn} = \frac{p_{mn}}{m},$$

следовательно,

$$p_{mn} = m \dot{q}_{mn} = -i\omega_0 m q_{mn}$$

или

$$p_{n-1,n} = m \dot{q}_{n-1,n} = -i\omega_0 m q_{n-1,n}$$

и

$$p_{n,n-1} = m \dot{q}_{n,n-1} = i\omega_0 m q_{n,n-1}.$$

В данном случае нумерацию нужно вести, начиная с нуля, т. е. первую строку и первый столбец считать нулевыми, вторые — первыми и т. д. Поэтому (принимая во внимание, что все индексы должны быть больше нуля) будем иметь для q и p следующие матрицы:

$$q = \begin{vmatrix} 0 & q_{01} & 0 & 0 \\ q_{10} & 0 & q_{12} & 0 \\ 0 & q_{21} & 0 & q_{23} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix};$$

$$p = i\omega_0 m \begin{vmatrix} 0 & -q_{01} & 0 & 0 \\ q_{10} & 0 & -q_{12} & 0 \\ 0 & q_{21} & 0 & -q_{23} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}.$$

Конечной целью нашего решения является получение выражения для стационарных уровней энергии осциллятора:

$$E = \frac{1}{2m} (p^2 + m^2 \omega_0^2 q^2). \quad (3-20)$$

Имея выражения для матриц q и p , легко составить матрицы q^2 и p^2 :

$$q^2 = \begin{vmatrix} q_{01}q_{10} & 0 & q_{21}q_{12} & \dots \\ 0 & q_{10}q_{01} + q_{12}q_{21} & 0 & \dots \\ q_{21}q_{10} & 0 & q_{21}q_{12} + q_{23}q_{32} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix};$$

$$p^2 = m\omega_0^2 \begin{vmatrix} q_{10}q_{01} & 0 & q_{21}q_{12} & \dots \\ 0 & q_{10}q_{01} + q_{12}q_{21} & \dots & \dots \\ -q_{21}q_{10} & 0 & q_{21}q_{12} + q_{23}q_{32} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}.$$

Подставляя эти матрицы в выражение (3-20), получаем матрицу энергии:

$$E = m\omega_0^2 \begin{vmatrix} q_{01}q_{10} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & q_{10}q_{01} + q_{12}q_{21} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & q_{21}q_{12} + q_{23}q_{32} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}.$$

Таким образом, для E получили диагональную матрицу. Вид матрицы говорит о том, что энергия не зависит от времени, т. е. процесс является стационарным. Каждый элемент такой матрицы представляет собой энергию стационарного состояния осциллятора на соответствующем уровне (определяемом числом n). Для окончательного решения задачи необходимо использовать соотношение

$$pq - qp = -ih. \quad (3-21)$$

Для этого составим матрицу

$$pq - qp = -2im\omega_0 \begin{vmatrix} q_{01}q_{10} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & q_{12}q_{21} - q_{10}q_{01} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & q_{23}q_{32} - q_{21}q_{12} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}.$$

Правая часть равенства (3-21) может быть представлена единичной матрицей:

$$-ih = -ih \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Сопоставляя соответствующие элементы этих двух матриц, мы приходим к следующей системе уравнений:

$$q_{01}q_{10} = \frac{h}{2m\omega_0};$$

$$q_{12}q_{21} - q_{01}q_{10} = \frac{h}{2m\omega_0};$$

$$q_{23}q_{32} - q_{21}q_{12} = \frac{h}{2m\omega_0}$$

и т. д.

Решение этой системы приводит к следующему соотношению:

$$q_{n,n+1}q_{n+1,n} = |q_{n,n+1}|^2 = (n+1) \frac{h}{2m\omega_0}.$$

Используя это решение для каждого диагонального члена матрицы энергии, получаем следующее общее выражение для энергии осциллятора при любом значении n :

$$E_{nn} = E_n = m\omega_0^2 (q_{n,n+1}q_{n+1,n} - q_{n,n-1}q_{n-1,n}),$$

откуда

$$E_n = (2n+1) \frac{h\omega_0}{2}$$

или окончательно

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\omega. \quad (3-21a)$$

Таким образом, приходим к результату, совпадающему с ранее полученным с помощью уравнения Шредингера.

Нулевая энергия. Выражение (3-21a) представляет собой фундаментальный результат, отличающийся от того, который был получен ранее на основе теории Бора:

$$E_n = nh\omega.$$

Квантовая механика дает для выражения энергии E_n дополнительный член, равный $E_0 = \frac{1}{2} h\omega$, соответст-

вующий случаю $n=0$. Величина E_0 называется нулевой энергией.

Остановимся несколько на этом принципиально важном и необычном для классической физики понятии.

Для классической физики мыслимо пространство, полностью свободное от электромагнитного поля. Квантовая физика это положение отрицает. Первые шаги в формировании более углубленного представления о «свободном пространстве» — носителе электромагнитной энергии — были сделаны Рэлеем и Джинсом. Напомним, что при исследовании проблемы теплового излучения пространство было представлено ими в виде совокупности (набора) осцилляторов, обладающих собственными частотами колебаний. Число этих осцилляторов, тождественно совпадающее с числом степеней свободы системы (пространства), зависело от размеров рассматриваемого объема. Если он был ограничен со всех сторон идеально отражающими стенками, то число осцилляторов представляло собой счетное множество, а в каждом единичном объеме число их оказывалось конечным.

Для неограниченного пространства число осцилляторов представляет собой несчетное множество — континуум, и в этом случае нужно было говорить об их плотности в единице объема. Именно эта плотность (условно введенная для очень больших чисел n) фигурирует в известной формуле Рэлея — Джинса и в формуле Планка. Таким образом, впервые было сформулировано понятие о пустом пространстве — вакууме, лишенном электромагнитного поля, как о своеобразном резервуаре потенциально возможных электромагнитных колебаний.

При обмене энергией между веществом и вакуумом в случае теплового равновесия у последнего имеется дополнительная энергия, равная $\frac{1}{2} \hbar \omega$, которая непосредственно не участвует в этом обмене, а остается связанной с осцилляторами вакуума. Таким образом, вакуум сам по себе обладает энергией, связанной с соответствующими осцилляторами. Эта энергия называется, может быть и не совсем удачно, нулевой энергией.

Заметим, что существование нулевой энергии полностью согласуется с соотношением неопределенностей, являясь его прямым следствием. Действительно, если этой энергии не было бы, то при температуре абсолют-

ного нуля колебания прекратились бы полностью и оказалось бы тогда возможным одновременное точное знание как координаты ($x=x_0$), так и импульса ($p_x=0$), что противоречило бы основному принципу квантовой механики.

3-7. СРАВНЕНИЕ КЛАССИЧЕСКОГО И КВАНТОВОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Как уже было сказано ранее, атом обладает внутренним запасом энергии. Переход атома из состояния с большей энергией в состояние с меньшей энергией сопровождается излучением, характеризующимся определенным спектром. Опыт подтверждает, что спектральные линии имеют определенную ширину, что объясняется в первую очередь кратковременностью жизни атома в возбужденном состоянии и, следовательно, самого акта излучения.

Анализируя форму спектральных линий, можно установить связь между шириной спектра и затуханием колебаний. Однако, если этот анализ проводить с позиций классической теории, мы придем к неверной трактовке процессов, происходящих в атоме.

Для того чтобы подтвердить сказанное выше, обратимся к следующему иллюстративному примеру.

Излучение классического осциллятора. Состояние классического линейного осциллятора может быть охарактеризовано изображающей точкой на фазовой плоскости.

Колебания осциллятора будут соответствовать движению этой точки в данной плоскости, которая опишет некоторую кривую. Предположим вначале, что колебания являются незатухающими. В этом случае энергия осциллятора остается неизменной и может быть, как известно, выражена в виде

$$E = \frac{p_m^2}{2m} + \frac{kq_m^2}{2} = \text{const.}$$

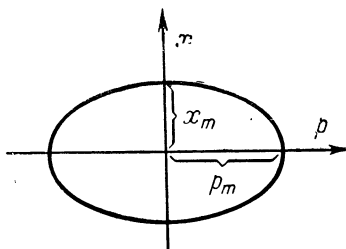


Рис. 3-7. Кривая движения изображающей точки для классического незатухающего осциллятора.

Это выражение является уравнением эллипса с полуосями p_m и $q_m = x_m$ (рис. 3-7). При этом изображающая точка будет двигаться по замкнутой кривой постоянной энергии. Площадь, охватываемая данной кривой, равна:

$$S = \pi x_m p_m,$$

но

$$p_m = \sqrt{2m_0 E}; \quad x_m = \sqrt{\frac{2E}{k}},$$

откуда

$$S = 2\pi E \sqrt{\frac{m_0}{k}} = \frac{2\pi E}{\omega_0}; \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m_0}}$$

и, следовательно,

$$E = S f,$$

где

$$f = \frac{\omega}{2\pi}.$$

При этом частота колебания осциллятора прямым образом связана с частотой излучения. Это идеализированный случай, предполагающий, что запас энергии осциллятора поддерживается постоянным.

Если же энергия осциллятора определяется лишь ее первоначальным запасом (при $t=0$) и затем никакого пополнения энергии осциллятор извне не получает, то его колебания будут затухающими со все увеличивающейся частотой. На фазовой плоскости этому случаю будет соответствовать движение изображающей точки по непрерывно свертывающейся к началу координат эллиптической спирали (рис. 3-8).

Излучение квантового осциллятора. С позиции квантовой теории процесс должен быть описан иначе.

Прежде всего согласно даже гипотезам Планка и Бора «орбиты» электронов (энергетические уровни) являются избранными. Поэтому на фазовой плоскости им будут соответствовать не любые эллипсы, а лишь их дискретный набор. Разность между величинами их площадей должна быть обязательно кратна $h\omega$ (рис. 3-9). Следовательно, в этом случае величина $S = nh\omega$, где $n = 1, 2, \dots$, и указанная выше разность между площадями эллипсов может быть представлена в виде известного частотного условия Бора:

$$\Delta S = \Delta n h \omega,$$

откуда

$$\Delta E = h\omega.$$

Из приведенного рассуждения легко видеть, что частота излучения здесь не связана с частотой колебания классического осциллятора, а определяется через энергию перехода, т. е. энергию, теряемую атомом при переходе его с одного энергетического уровня на другой.

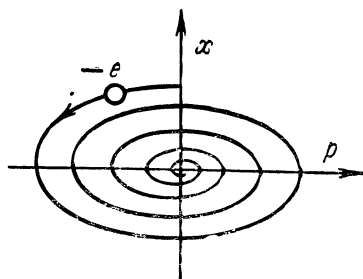
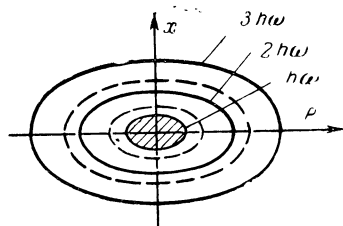


Рис. 3-8. Кривая движения изображающей точки для классического затухающего осциллятора.



Область
недопустимых
энергий

Рис. 3-9. Кривые движения изображающей точки для квантового осциллятора в стационарных режимах.

— разрешенные уровни;
--- запрещенные уровни.

Из изложенного следует также, что коэффициент затухания колебаний классического осциллятора при квантовой трактовке эквивалентен обратной величине средней длительности жизни атома в возбужденном состоянии. Иными словами, время релаксации для классического осциллятора совпадает с временем жизни атома для квантового осциллятора. Исходя из такого соответствия, легко показать, чем обуславливается ширина спектральной линии, исходя из представлений квантовой теории.

Так как возбужденное состояние атома ограничено во времени, то, следовательно, мы располагаем конечным отрезком времени для наблюдения и измерения определенного состояния квантовой системы. Это ограничение по времени, которое мы обозначим через Δt , в силу соотношения

$$\Delta(E_n - E_m) \Delta t \approx h$$

гарантирует постоянство разности $E_n - E_m$ с некоторой неопределенностью $\Delta(E_n - E_m)$. А так как согласно условию Бора

$$E_n - E_m = \hbar \omega_{nm},$$

то ясно, что излучение будет происходить не точно на частоте ω_{nm} , а в некоторой полосе, определяемой соотношением

$$\Delta\omega = \frac{\Delta(E_n - E_m)}{\hbar}.$$

Несмотря на существенное различие приведенных выше интерпретаций процесса излучения, спектральная линия формально с точки зрения квантовой теории может быть описана той же лоренцевской кривой, что и в случае классического осциллятора:

$$g(\omega) = \frac{1}{(\omega_0 - \omega)^2 + \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2},$$

где

$$\gamma = \frac{1}{\tau} = A_{21},$$

т. е. равна коэффициенту Эйнштейна для спонтанного излучения.

Необходимо отметить также еще два важных обстоятельства. Во-первых, практически «орбиты» при квантовой трактовке процесса имеют некоторую ширину, и, во-вторых, энергия квантового осциллятора не может обратиться в нуль, а будет иметь некоторую определенную минимальную величину, равную $\frac{1}{2} \hbar \omega$.

3.8. АТОМ КАК КВАНТОВЫЙ ИЗЛУЧАТЕЛЬ

Атом как квантовый излучатель. С точки зрения излучения и поглощения электромагнитной энергии атомы вещества можно рассматривать в общем случае как мультипольные системы. По определению мультиполь представляет собой систему парных, разноименных по знаку зарядов, обладающую определенной симметрией. Система двух зарядов носит название диполя, четырех-квадрополя, восьми-октуполя и т. д. Каждый такой

мультиполь характеризуется своим моментом, порядок которого n связан с полным числом зарядом N системы зависимостью $N = 2^n$.

Однако под мультиполем можно понимать также произвольное достаточно компактное распределение зарядов. Результирующий момент такого мультиполя может быть представлен в виде ряда, члены которого составляют моменты различных порядков. Именно такое представление является наиболее общим и очень удобным в тех случаях, когда размеры системы зарядов много меньше расстояния от зарядов до точки наблюдения (когда на излучающую систему «смотрят» издалека). В частности, оно удобно для описания излучающих свойств атомных структур. В этом случае, имея в виду размеры атома (средний «радиус» атома равен $\sim 10^{-8}$ см) по сравнению с расстояниями до точек, в которых определяется поле излучения, можно утверждать, что ряд будет быстро сходящимся. Действительно, как показывают элементарные расчеты, для средней части видимого спектра ($\lambda \approx 5000 \text{ \AA}$) квадрупольное излучение слабее дипольного приблизительно в 10^6 раз. Эта цифра говорит о том, что «дипольное приближение» остается справедливым вплоть до ультрафиолетовой части излучения.

С точки зрения квантовой теории электрический дипольный момент атома имеет следующий физический смысл.

Движение электрона вокруг ядра атома можно охарактеризовать распределением вероятности нахождения электрона в той или иной точке пространства внутри атома. Совокупность всех таких точек можно рассматривать как некоторое «электронное облако» с различной по пространству и во времени плотностью. Выражение

$$\Psi_n^* \Psi_n dV = \psi_n^* \psi_n dV$$

представляет собой вероятность нахождения электрона в элементе объема dV , а величина $e\psi_n^* \psi_n$ (где e — абсолютное значение заряда электрона) — эффективную плотность заряда в данном объеме. Результирующий вектор (среднее значение) электрического дипольного момента, очевидно, будет равен:

$$P_{nn} = -e \int \psi_n^* \psi_n \mathbf{r} dV,$$

а проекции момента на оси декартовых координат:

$$p_{nn}^{(x)} = -e \int \psi_n^* x \psi_n dV;$$

$$p_{nn}^{(y)} = -e \int \psi_n^* y \psi_n dV;$$

$$p_{nn}^{(z)} = -e \int \psi_n^* z \psi_n dV;$$

здесь \mathbf{r} — радиус-вектор, проведенный из начала координат, в котором помещено ядро атома, к произвольной точке «электронного облака»;

x, y, z — проекции \mathbf{r} на оси координат.

Вследствие симметричности распределения заряда относительно центра координатной системы, где помещено ядро атома, приведенные выше интегралы равны нулю. Таким образом, этот случай соответствует стационарным состояниям атома, не связанным с переходами, а следовательно, и с процессом излучения (или поглощения).

Ввиду того, что между двумя произвольными уровнями n и m могут быть переходы в обе стороны ($n \rightarrow m$ и $m \rightarrow n$), целесообразно рассмотреть дипольный электрический момент (в частности, его проекцию на ось x) такого вида:

$$p_{nm}^{(x)} = -e \int (\psi_m^* x \psi_n + \psi_n^* x \psi_m) dV$$

или

$$p_{nm}^{(x)} = -e \int \psi_m^* x \psi_n e^{i\omega_{nm}t} dV - e \int \psi_n^* x \psi_m e^{-i\omega_{nm}t} dV.$$

Здесь

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{h}.$$

Обозначим:

$$x_{mn} = \int \psi_m^* x \psi_n dV; \quad x_{nm}^* = \int \psi_n^* x \psi_m dV.$$

Имея в виду, что x_{mn} — действительные числа, т. е. что $x_{mn} = x_{nm}^*$, напомним:

$$p_{nm}^{(x)} = -e x_{mn} (e^{i\omega_{nm}t} + e^{-i\omega_{nm}t})$$

или

$$p_{nm}^{(x)} = -2e x_{mn} \cos \omega_{nm}t.$$

Аналогичным способом найдем выражения и для других составляющих p_{nm} :

$$p_{nm}^{(y)} = -2ey_{mn} \cos \omega_{nm}t;$$

$$p_{nm}^{(z)} = -2ez_{mn} \cos \omega_{nm}t.$$

Таким образом, для вектора p_{nm} можно записать:

$$p_{nm} = -2e\mathbf{r}_{mn} \cos \omega_{nm}t,$$

где \mathbf{r}_{mn} является матричным элементом,

$$\mathbf{r}_{mn} = \int \psi_m^* \hat{\mathbf{r}} \psi_n dV.$$

Из изложенного особенно отчетливо выступает различие между гармоническими осцилляторами в классическом и квантовом представлениях.

В соответствии с полным набором собственных частот классического линейного осциллятора мы можем представить его дипольные моменты в виде ряда Фурье:

$$p_1 e^{i\omega_1 t}; \quad p_2 e^{i\omega_2 t}; \quad \dots; \quad p_n e^{i\omega_n t},$$

где ω_1 — частота основного колебания;
 $\omega_2, \omega_3, \dots, \omega_n$ — частоты колебаний высших порядков (обертонов).

Атом как квантовый осциллятор также обладает совокупностью дипольных моментов, которая математически может быть представлена более сложным выражением в виде элементов некоторой матрицы

$$p(t) = \begin{vmatrix} p_{11} & p_{12}e^{i\omega_{12}t} & p_{1n}e^{i\omega_{1n}t} & \dots \\ p_{21}e^{i\omega_{21}t} & p_{22} & \dots & p_{23}e^{i\omega_{23}t} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}.$$

При этом частоты, вычисляемые по формуле

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{h},$$

также образуют матрицу:

$$\omega = \begin{vmatrix} 0 & \omega_{12} & . & . & \omega_{1n} \\ \omega_{21} & 0 & . & . & \omega_{2n} \\ \omega_{31} & \omega_{32} & . & . & . \end{vmatrix}.$$

Частоты ω_{ii} , расположенные по диагонали, тождественно равны нулю. Им соответствуют диагональные элементы p_{ii} матрицы $p(t)$, которые являются либо постоянными величинами, либо также равными нулю.

Недиagonальные элементы матрицы $p(t)$ являются функциями времени и определяют излучение или поглощение атома на частотах, вычисляемых по известной формуле Бора. Некоторые из этих матричных элементов могут оказаться равными нулю, что будет указывать на запрещенность данного перехода. В противном случае они будут являться разрешенными. Однако следует оговориться, что обычно используемые на практике методы решения являются, как правило, приближенными. Поэтому сделанное на основе таких решений категорическое утверждение, что данный переход является запрещенным, будет не всегда верным. Правильнее говорить в этих случаях о малой, но не нулевой вероятности этого события. В частности, к таким случаям следует отнести попадание атома на так называемые метастабильные уровни, играющие большую роль в работе квантовых приборов. Время жизни атомов на таких уровнях по сравнению с обычными уровнями очень велико, а следовательно, вероятность переходов относительно мала.

В тех случаях, когда дипольный момент оказывается практически равным нулю, необходимо учитывать следующие по порядку моменты, а именно — квадрупольный и магнитный.

Правило отбора для дипольных переходов. В качестве иллюстрации практического использования матричных элементов перехода рассмотрим вывод правила отбора для магнитного квантового числа M , приведенный в книге Г. Герцберга [Л. 12].

Пусть собственными функциями верхнего и нижнего состояний некоторой системы будут соответственно:

$$\psi_1 = \xi_1 e^{iM_1\varphi}; \quad \psi_2 = \xi_2 e^{iM_2\varphi}.$$

Если направление магнитного поля совпадает с осью Oz , зависимость собственных функций от угла φ полностью учитывается множителем $e^{iM\varphi}$.

Матричный элемент r_{21} , связанный с переходом $2 \rightarrow 1$, имеет z -ю составляющую, равную

$$r_{21}^{(z)} = \int \psi_2^* z \psi_1 dV = \int \xi_2^* z \xi_1 e^{i(M_1 - M_2)\varphi} dV.$$

Введем цилиндрические координаты ρ , φ , z . Тогда элемент объема

$$dV = \rho d\varphi dz d\rho; \quad x = \rho \cos \varphi; \quad y = \rho \sin \varphi.$$

В этой системе координат

$$\begin{aligned} r_{21}^{(z)} &= \int \psi_2^* z \psi_1 dV = \iiint \xi_2^* z \xi_1 e^{i(M_1 - M_2)\varphi} \rho d\rho d\varphi dz = \\ &= \iint \xi_2^* z \xi_1 \rho dz d\rho \int_0^{2\pi} e^{i(M_1 - M_2)\varphi} d\varphi. \end{aligned}$$

Очевидно, что $r_{21}^{(z)}$ отлично от нуля в том случае, если

$$\int_0^{2\pi} e^{i(M_1 - M_2)\varphi} d\varphi \neq 0,$$

а это возможно только при условии, что $M_1 = M_2$. Иначе говоря, $\Delta M = 0$.

Для x -компоненты матричного элемента получим:

$$\begin{aligned} r_{21}^{(x)} &= \int \psi_2^* x \psi_1 dV = \iiint \xi_2^* x \xi_1 e^{i(M_1 - M_2)\varphi} \rho \cos \varphi d\varphi dz = \\ &= \iint \xi_2^* x \xi_1 \rho^2 d\rho dz \int_0^{2\pi} e^{i(M_1 - M_2)\varphi} \cos \varphi d\varphi. \end{aligned}$$

Поскольку

$$\cos \varphi = \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2},$$

последний интеграл можно представить в виде

$$\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} e^{i(M_1 - M_2 + 1)\varphi} d\varphi + \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} e^{i(M_1 - M_2 - 1)\varphi} d\varphi.$$

Эта сумма отлична от нуля лишь в том случае, когда

$$\Delta M = \pm 1.$$

Таким образом, правила отбора по числу M для дипольных переходов имеют вид:

$$\Delta M = 0; \pm 1.$$

Аналогичным образом могут быть получены правила переходов и для других квантовых чисел. Здесь же мы ограничимся лишь формулировкой этих правил, причем заметим, что они справедливы лишь для излучения одного фотона.

Для главного квантового числа n возможны любые переходы, т. е. разность между двумя какими-либо уровнями может принимать любые целочисленные значения:

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

Переход $\Delta n = 0$ соответствует переходам внутри данного мультиплета, причем они могут отвечать частотам, лежащим в диапазоне радиоволн.

Переходы $\Delta n = 1, 2 \dots$ и т. д. соответствуют различным спектральным сериям (например, для атома водорода — известным сериям Лаймана, Бальмера, Пашена и др.).

Изменение орбитального квантового числа подчиняется условию:

$$\Delta l = \pm 1.$$

Это правило выражает закон сохранения момента количества движения для системы атом + фотон, так как каждый фотон $h\omega$ несет в себе момент количества движения, равный h .

Для орбитального магнитного квантового числа имеем:

$$\Delta m_l = 0; \pm 1.$$

Аналогичные числу M условия $(0; \pm 1)$ существуют и для других полных квантовых чисел, а именно для Δj , Δm_j , ΔL , ΔS , ΔJ .

Исключением является случай одновременного выполнения условий $\Delta J = 0$ и $\Delta M = 0$. В этом частном случае переход также запрещен.

Следует обратить внимание на то, что переходы (для водородоподобных атомов) являются разрешенными лишь при одновременном выполнении условий для Δl , Δl и Δm_l .

Что касается многоэлектронных атомов, то для них наблюдается некоторое отклонение от этого правила.

Примерная диаграмма возможных переходов для натрия, изображенных косыми линиями, дана на рис. 3-10.

Коэффициенты Эйнштейна. Перейдем теперь к определению коэффициентов поглощения и излучения (коэффициентов Эйнштейна). Напомним, что энергия, излучаемая классическим диполем в единицу времени, имеет выражение

$$-\frac{dE}{dt} = \frac{1}{12\pi\epsilon_0} \frac{e^2 r^2 \omega_0^4}{c^3},$$

где r — расстояние между зарядами диполя.

В нашем случае $r \rightarrow r_{mn}$, причем

$$r_{mn}^2 = x_{mn}^2 + y_{mn}^2 + z_{mn}^2$$

и

$$e^2 r_{mn}^2 = \mathbf{p}_{mn}^* \mathbf{p}_{mn} = |\mathbf{p}_{mn}|^2 = 4e^2 (x_{mn}^2 + y_{mn}^2 + z_{mn}^2).$$

Коэффициент Эйнштейна A_{nm} равен энергии излучения в единицу времени, деленной на $\hbar\omega_{mn}$, т. е.

$$A_{nm} = \frac{\omega_{mn}^3}{12\pi\epsilon_0 \hbar c^3} (\mathbf{p}_{mn}^* \mathbf{p}_{mn}).$$

Это выражение соответствует излучению осциллятора с моментом

$$\mathbf{p}_{mn} = -2e\mathbf{r}_{mn} \cos \omega_{nm}t,$$

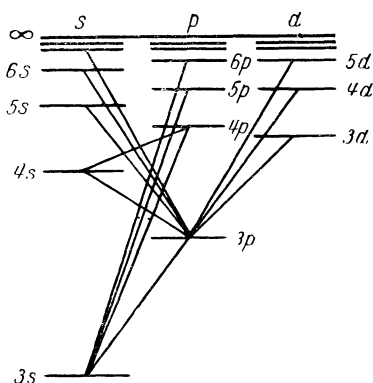


Рис. 3-10. Примерная диаграмма возможных переходов для атома натрия. (Переходы между различными уровнями определяют линии излучения.)

где

$$r_{mn} = \int_V \psi_m^* r \psi_n dV.$$

Воспользовавшись известным соотношением (см. § 2-1)

$$A_{nm} = \frac{\hbar \omega_{nm}^3}{\pi^2 c^3} B_{nm},$$

получим:

$$B_{nm} = B_{mn} \frac{\pi}{12 \epsilon_0 \hbar^2} (\mathbf{p}_{mn}^* \mathbf{p}_{mn}).$$

Таким образом, нами найдены выражения (а не только соотношения между ними) для всех коэффициентов Эйнштейна. Для окончательного их определения надо лишь вычислить:

$$(\mathbf{p}_{mn}^* \mathbf{p}_{mn}) = e^2 (\mathbf{r}_{mn}^* \mathbf{r}_{mn}) = e^2 r_{mn}^2.$$

Приближенно, величина $r_{mn} \approx r_n - r_m$ может быть оценена по теории Бора, согласно которой расстояние электрона от ядра атома (водорода), находящегося в основном состоянии, равно $r_1 = 0,528 \text{ \AA}$, а в возбужденных состояниях $r_n = n^2 r_1$, где $n = 2, 3 \dots$

3-9. ВЫЧИСЛЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕХОДОВ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ АТОМОВ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

Атом и монохроматическая волна. Рассматриваемая в этом параграфе задача является основной для квантовой электроники. Она непосредственно связана с вычислением вероятностей квантовых переходов, при которых происходит поглощение электромагнитных волн или индуцированное излучение.

Для того чтобы ознакомиться с ходом этих процессов, вполне достаточно рассмотреть наиболее простой случай, когда с атомами вещества вступает во взаимодействие монохроматическая волна. Практически задача еще более упрощается в связи с тем, что на электроны атомов действует в основном лишь электрическая составляющая поля. Пренебрежение действием магнитной составляющей поля объясняется тем, что скорости элек-

тронов весьма малы по сравнению со скоростью света и поэтому лоренцова сила оказывается ничтожно малой.

Кроме того, поскольку длина волны поля обычно весьма велика по сравнению с размерами атома, поэтому фаза напряженности электрического поля в пределах атома может считаться в каждый момент времени одной и той же:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \sin \omega t.$$

Будем считать, что падающая на атом волна поляризована в направлении оси Ox . В этом случае оператор энергии взаимодействия будет равен:

$$U = -\mathbf{p}\mathcal{E} = e\mathcal{E}x = e\mathcal{E}_0 x \sin \omega t,$$

где x — проекция дипольного момента атома;
 e — абсолютное значение заряда электрона.

Для определения вероятности перехода с какого-либо уровня E_i на уровень E_k воспользуемся ранее полученной формулой:

$$|c_k(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t U_{ki}(\tau) e^{i\omega_{ki}\tau} d\tau \right|^2 \text{ при } i \neq k.$$

Используя выражение для U , находим:

$$|U_{ki}|^2 = e^2 \mathcal{E}_0^2 \sin^2 \omega t |x_{ki}|^2.$$

Подставляя это значение и производя интегрирование, получаем:

$$\begin{aligned} |c_k(t)|^2 &= \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} |x_{ki}|^2 \left| \int_0^t \sin \omega \tau e^{i\omega_{ki}\tau} d\tau \right|^2 = \\ &= \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{4\hbar^2} |x_{ki}|^2 \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{ki} + \omega)t}}{\omega_{ki} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{ki} - \omega)t}}{\omega_{ki} - \omega} \right|^2. \quad (3-22) \end{aligned}$$

Очевидно, что вероятность перехода окажется существенной в двух случаях: либо когда

$$\omega_{ki} - \omega \approx 0; \quad E_i + \hbar\omega \approx E_k,$$

т. е. при поглощении атомом энергии, либо когда

$$\omega_{ki} + \omega \approx 0; E_i = E_k + \hbar\omega.$$

т. е. при индуцированном излучении.

Как видно из выражения (3-22), вероятность перехода зависит от матричного элемента $|x_{ki}|^2$.

Если $x_{ki} = 0$, то такой переход является запрещенным. При произвольной поляризации переход будет запрещен в том случае, если одновременно будут равны нулю все матричные элементы проекций x_{ki} , y_{ki} , z_{ki} .

Система с двумя уровнями. Обратимся к конкретному случаю системы с двумя энергетическими уровнями, находящейся в переменном электромагнитном поле, частота которого равна ω .

Такая задача, являясь наиболее простой, представляет определенный практический интерес.

Если исходить из общей формулы, то выражение для вероятности перехода возбужденной частицы на основной уровень ($E_2 \rightarrow E_1$) получает следующий вид:

$$|c_1(t)|^2 = \frac{4 \left| \frac{p\mathcal{E}_0}{\hbar} \right|^2}{(\Delta\omega)^2 + \left| \frac{p\mathcal{E}_0}{\hbar} \right|^2} \sin^2 \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta\omega)^2 + \left| \frac{p\mathcal{E}_0}{\hbar} \right|^2} t,$$

где $\Delta\omega = \omega_{21} - \omega$ (ω — частота поля).

Из этого выражения видно, что вероятность перехода существенно зависит от соотношения частот — резонансной частоты квантовой системы (частоты перехода ω_{21}) и частоты взаимодействующего с ней поля (ω). Вероятность резко повышается, когда $\omega = \omega_{21}$. В этом случае вероятность может достичь значения единицы, т. е. переход явится событием, достоверным по прошествии времени, обращающего выражение для $|c_1(t)|^2$ в единицу (рис. 3-11).

Очевидно, что это время равно:

$$t = \frac{\pi\hbar}{p\mathcal{E}_0}.$$

Кроме того, из исходного и только что полученного выражений видно, что вероятность перехода будет тем выше, чем больше интенсивность внешнего поля.

Излучаемая энергия может быть вычислена по формуле:

$$E_{21} = N_2 h \omega_{21} |c_1|^2,$$

а выходная мощность — по формуле:

$$P = \frac{dE_{21}}{dt} = N_2 h \omega_{21} \frac{d|c_1(t)|^2}{dt}.$$

Выражение для средней мощности вынужденного излучения с учетом релаксационных процессов можно вывести, исходя из следующих рассуждений.

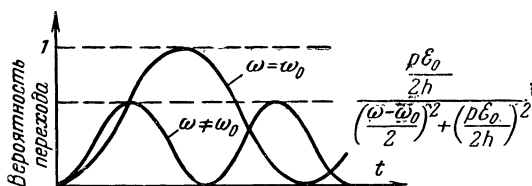


Рис. 3-11. График зависимости вероятности перехода от времени двухуровневой системы.

Система (атом) находится в возбужденном состоянии в течение конечного промежутка времени t_1 , обусловленного, в частности, внутренними процессами в веществе. Для того чтобы получить выражение для средней мощности излучения, необходимо мгновенную мощность усреднить по t_1 .

Мгновенная мощность излучения при переходе частицы с верхнего уровня на нижний равна:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= h\omega \frac{d}{dt} |c_1(t)|^2 = \\ &= \frac{4h\omega \left| \frac{p\epsilon_0}{2h} \right|^2 \sin \sqrt{(\Delta\omega)^2 + \left| \frac{p\epsilon_0}{h} \right|^2} (t - t_1)}{\sqrt{(\Delta\omega)^2 + \left| \frac{p\epsilon_0}{h} \right|^2}}. \end{aligned}$$

Вероятность перехода, происходящего за интервал времени от t_1 до $t_1 + dt_1$, определяется выражением

$$\frac{1}{\tau_2} e^{-\frac{t-t_1}{\tau_2}},$$

где τ_2 — время спин-спиновой релаксации.

Усреднение полученного выше выражения для dE/dt , произведенное по t_1 , дает следующее выражение:

$$\left(\overline{\frac{dE}{dt}}\right) = \int_{-\infty}^t \frac{dE(t-t_1)}{dt} \frac{1}{\tau_2} e^{-\frac{t-t_1}{\tau_2}} dt_1.$$

Произведя интегрирование, получим окончательное выражение для средней мощности излучения:

$$\left(\overline{\frac{dE}{dt}}\right) = \frac{2h\omega}{\tau_2} \left| \frac{p\mathcal{E}_0}{2h} \right|^2 \frac{1}{(\Delta\omega)^2 + \left(\frac{1}{\tau_2}\right)^2 + \left| \frac{p\mathcal{E}_0}{h} \right|^2}.$$

Рассмотрим случай резонанса, т. е. случай, когда $\Delta\omega=0$. В этом случае

$$\left(\overline{\frac{dE}{dt}}\right) = \frac{2h\omega_{21}}{\tau_2} \left| \frac{p\mathcal{E}_0}{2h} \right|^2 \frac{1}{\left(\frac{1}{\tau_2}\right)^2 + \left| \frac{p\mathcal{E}_0}{h} \right|^2}. \quad (3-23)$$

Если

$$\left(\frac{1}{\tau_2}\right)^2 \gg \left| \frac{p\mathcal{E}_0}{h} \right|^2,$$

то можно записать:

$$\left(\overline{\frac{dE}{dt}}\right) = \frac{1}{2} h\omega_{21}\tau_2 \left| \frac{p\mathcal{E}_0}{h} \right|^2.$$

Из этого выражения следует, что средняя мощность излучения линейно зависит от интенсивности поля $|\mathcal{E}_0|^2$. Этот случай соответствует условию линейного усиления. Кроме того, из этого выражения видно, что мощность излучения пропорциональна времени релаксации τ_2 . С физической точки зрения это совершенно ясно, если учесть, что это время характеризует степень когерентности излучения: чем больше τ_2 , тем когерентность выше.

При увеличении интенсивности внешнего поля, когда слагаемые в знаменателе выражения (3-23) становятся соизмеримыми величинами, средняя мощность излучения будет связана с плотностью энергии внешнего поля нелинейной зависимостью. Эта зависимость характеризует приближение системы к условию насыщения и падение эффекта усиления индуцированного излучения, стремящегося в пределе, при очень сильных полях, к нулю.

В заключение отметим, что полученное выше выражение для вероятности перехода в случае взаимодействия электромагнитного поля с электрическим диполем атома остается справедливым (при тех же исходных условиях и допущениях) и для случая взаимодействия поля с магнитными атомными диполями. Для этого следующая выражение (3-23) примет вид:

$$|c_1(t)|^2 = \frac{\left| \frac{\mu B_0}{h} \right|^2}{(\Delta\omega)^2 + \left| \frac{\mu B_0}{h} \right|^2} \sin^2 \left[\frac{1}{2} \sqrt{(\Delta\omega)^2 + \left| \frac{\mu B}{h} \right|^2} t \right].$$

3-10. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СВОБОДНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ СОВОКУПНОСТЬЮ РАДИАЦИОННЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

В § 1-1 был описан способ представления поля излучения в замкнутой полости ограниченного размера совокупностью осцилляторов. Очевидно, беспредельное увеличение размеров полости приведет к несчетному множеству (континууму) осцилляторов, собственные частоты которых изменяются непрерывно, образуя сплошной спектр. Однако для дискретного представления поля в свободном, т. е. неограниченном, пространстве существует другой, более общий метод. Он заключается в разложении поля в тройной ряд Фурье с использованием упоминаемых нами ранее так называемых периодических граничных условий.

Обычно свободное электромагнитное поле может быть описано лишь одним векторным потенциалом, который мы запишем в следующем виде:

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}} [\mathbf{A}_{\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} + \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}].$$

Здесь суммирование производится по всем \mathbf{k} , являющимся волновыми векторами с проекциями на оси x, y, z , равными

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x; \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y; \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z,$$

где L — пространственный период, а n_x, n_y, n_z могут быть как положительными, так и отрицательными числами, причем

$$k^2 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2).$$

Ранее было найдено выражение (см. § 1-1, гл. 1) для числа осцилляторов, частоты которых лежат в интервале от ω до $\omega + d\omega$. Так как $\omega = kc$, то, очевидно, такое разложение по частотам эквивалентно разложению по волновым числам в интервале от k до $k + dk$.

Наибольшее значение имеет та часть спектра, в котором сосредоточивается максимум энергии излучения. При средних температурах этот максимум находится в инфракрасной области спектра, т. е. в области с длинами волн порядка 10^{-4} см, что соответствует волновым числам порядка 10^4 — 10^5 см $^{-1}$. Отсюда следует, что при увеличении на одну волну суммы длин волн, укладываемых между соседними гранями кубика, число k изменится на ничтожно малую величину. Это позволяет, как и в предыдущем случае, считать k непрерывно изменяющейся величиной и ввести для нее функцию плотности.

Используя выражения для k_x, k_y, k_z и учитывая, что

$$dk_x = \left(\frac{2\pi}{L}\right) dn_x;$$

$$dk_y = \left(\frac{2\pi}{L}\right) dn_y; \quad dk_z = \left(\frac{2\pi}{L}\right) dn_z,$$

получаем для числа осцилляторов в единицу объема и соответствующем интервале волновых чисел от k до $k + dk$ следующее выражение:

$$dN_1 = dn_x dn_y dn_z = \frac{V}{(2\pi)^3} dk_x dk_y dk_z.$$

Таким образом, мы перешли от пространства чисел n к k -пространству, для которого

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2.$$

Элемент объема в сферической системе координат такого пространства равен $k^2 dk d\Omega$, где $d\Omega$ — элементарный телесный угол.

В данном случае необходимо учесть все возможные в полном телесном угле направления распространения волн, определяемые волновым вектором \mathbf{k} . Так как какого-либо преимущественного направления нет, следовательно, мы имеем дело со случаем сферически-симметричного излучения.

Интегрирование по углу Ω дает:

$$dN_1 = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} V k^2 dk.$$

Так как

$$k^2 = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^2},$$

то получим:

$$dN'_1 = \frac{\omega^2}{2\pi^2 c^2} V d\omega.$$

Это выражение дает число возможных значений \mathbf{k} в интервале от ω до $\omega + d\omega$. Если учесть два вида возможностей поляризации, то формула для числа осцилляторов, находящихся в интервале от ω до $\omega + d\omega$, примет вид:

$$dN = 2dN_1 = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^2} V d\omega.$$

Таким образом, мы пришли точно к такому же результату, который был получен ранее с использованием граничных условий идеально отражающих стенок.

Подчеркнем, что рассмотренное нами выше представление электромагнитного поля в свободном пространстве совокупностью радиальных осцилляторов является приемом классической электродинамики. Однако такое преобразование является необходимым шагом при вторичном квантовании электромагнитного поля. Этому вопросу посвящается заключительный параграф книги.

3-11. КВАНТОВАНИЕ СВОБОДНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ (ВТОРИЧНОЕ КВАНТОВАНИЕ)

Общие замечания. Очевидно, наиболее полно и точно задача о взаимодействии поля с частицами вещества может быть решена при условии, если энергию поля

подобно энергии частиц подвергнуть квантованию. Таким образом, от полуклассической теории излучения перейдем к последовательно квантовой теории.

Преобразования, связанные с этим переходом, состоят в следующем. Максвелловские уравнения поля необходимо преобразовать в уравнения в форме Гамильтона, что будет означать переход от представления поля в виде сплошной среды к представлению его в виде дискретной совокупности радиационных осцилляторов. Следующим шагом является превращение полученных выше классических осцилляторов в квантовые. Наконец, использование специальных операторов, называемых операторами рождения и уничтожения фотонов, позволит с позиций квантовой теории описать процессы взаимодействия поля с частицами как процессы взаимодействия совокупности радиационных осцилляторов с множеством осцилляторов вещества. Перейдем к изложению указанных выше преобразований.

Поле как совокупность радиационных осцилляторов. Для простоты рассмотрим свободное электромагнитное поле, заполняющее неограниченное пространство. Поскольку для поля справедливы такие понятия, как энергия, импульс и момент количества движения, а следовательно, и законы их сохранения, то с механической точки зрения поле следует рассматривать как систему с бесконечным числом степеней свободы, представляющих собой координаты точек пространства, занимаемого полем. Амплитуды потенциалов поля \mathbf{A} , φ , являющиеся непрерывными функциями пространственных координат и времени, играют в данном случае роль обобщенных координат.

Далее с помощью известного условия Лоренца

$$\operatorname{div} \mathbf{A} + \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0$$

нормируют векторный потенциал \mathbf{A} таким образом, чтобы скалярный потенциал φ во всем рассматриваемом пространстве оказался тождественно равным нулю. В этом случае векторный потенциал \mathbf{A} будет удовлетворять уравнению

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0,$$

где

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t).$$

Первым из перечисленных выше преобразований является переход от несчетного множества значений \mathbf{A} к счетному множеству значений $\mathbf{A}_k, \mathbf{A}_k^*$. Этот переход производится посредством разложения функции \mathbf{A} в тройной ряд (по координатам x, y, z) Фурье и подчинения компонент этого ряда периодическим граничным условиям. Этот метод был изложен в предыдущем параграфе. Он привел к следующему выражению векторного потенциала:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{A}_k e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} + \mathbf{A}_k^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)})$$

или сокращенно

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} [\mathbf{A}_k(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}_k^*(\mathbf{r}, t)], \quad (3-24)$$

где \mathbf{k} — волновой вектор, проекции которого на оси координат равны:

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x; k_y = \frac{2\pi}{L} n_y; k_z = \frac{2\pi}{L} n_z,$$

а n_x, n_y, n_z — целые числа.

В дальнейшем для упрощения записи векторный индекс « \mathbf{k} » заменим скалярным « k », хотя суммирование в выражении (3-24) производится не по волновому числу k , а по волновому вектору \mathbf{k} .

Выражение (3-24) для последующих преобразований удобнее представить через нормальные координаты (с разделяющимися переменными):

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} [g_k(t) \mathbf{A}'_k(\mathbf{r}) + g_k^*(t) \mathbf{A}'_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})],$$

где

$$\mathbf{A}'_k(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_k^{(\sigma)} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}; \quad \mathbf{A}'_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^{(\sigma)} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}};$$

$\mathbf{e}_k^{(\sigma)}$ — единичный вектор, совпадающий по направлению с направлением плоскости поляризации σ .

Дальнейшим шагом является переход от комплексных переменных g_k , g_k^* к действительным переменным p_k , q_k , играющим роль канонических сопряженных величин классической механики и удовлетворяющим уравнению линейного гармонического осциллятора.

Для этого необходимо энергию поля выразить через обобщенные координаты p_k , q_k , связав последние с переменными g_k , g_k^* . Известно, что энергия поля, выраженная через напряженности поля, равна:

$$E = \frac{1}{2} \int_V (\varepsilon_0 \mathcal{E}^2 + \mu_0 \mathcal{H}^2) dV. \quad (3-25)$$

Воспользовавшись известными соотношениями

$$\mathcal{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}; \quad \mathcal{H} = \frac{1}{\mu_0} \text{rot } \mathbf{A}$$

и учитывая связь между $|\mathbf{A}_k|^2$ и $|g_k|^2$, легко привести выражение (3-25) к следующему виду:

$$E = 2V\varepsilon_0 \sum_k \omega_k^2 g_k^* g_k. \quad (3-26)$$

Для того чтобы установить еще большее сходство между плоскими волнами и радиационными осцилляторами, вводят гамильтоновские переменные, связанные с g_k и g_k^* следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} q_k &= \alpha (g_k + g_k^*); \\ p_k &= -\dot{q}_k = -i\omega_k \alpha (g_k - g_k^*). \end{aligned} \quad (3-27)$$

Именно этот вид соотношений при соответствующем подборе коэффициента α дает возможность произвести замену переменных и получить известное выражение для энергии классического осциллятора в виде

$$E = \frac{1}{2} \sum_k (p_k^2 + \omega_k^2 q_k^2).$$

В этом случае коэффициент α оказывается равным

$$\alpha = \sqrt{V\varepsilon_0};$$

Переход от классических осцилляторов к квантовым.

Для перехода от классического осциллятора к квантовому необходимо ввести в полученное выражение для E постоянную Планка \hbar . Это достигается следующим образом. Согласно фотонной теории энергия поля (без учета нулевых энергий) может быть представлена формулой:

$$E = \sum_k n_k \hbar \omega_k, \quad (3-28)$$

где n_k — число фотонов, приходящихся на один радиационный осциллятор с фиксированным значением вектора \mathbf{k} . Приравнявая друг другу выражения (3-26) и (3-28), получаем:

$$g^*_k g_k = \frac{\hbar n_k}{2\epsilon_0 V \omega_k} = C_k^2 n_k, \quad (3-29)$$

где

$$C_k^2 = \frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_k}.$$

Таким образом, множитель $\sqrt{n_k}$ характеризует дискретность значений амплитуд поля (поскольку энергия $E \sim g^*_k g_k \sim n_k$).

Операторы рождения и уничтожения фотонов. Следующим шагом в квантовании поля является использование операторов \hat{q}_k и \hat{p}_k , соответствующих введенным нами переменным q_k и p_k , и подчинение их известному перестановочному соотношению:

$$\hat{q}_k \hat{p}_k - \hat{p}_k \hat{q}_k = -i\hbar.$$

Исходя из равенств (3-27) и (3-29), получим для этих операторов соотношения вида

$$\hat{g}^*_k \hat{g}_k - \hat{g}_k \hat{g}^*_k = C_k^2.$$

Из соотношений (3-27) найдем связь между новыми (действительными) q_k , p_k и старыми (комплексными) g_k , g^*_k переменными:

$$g_k = \frac{1}{2\alpha} \left(q_k + i \frac{p_k}{\omega_k} \right);$$

$$g^*_k = \frac{1}{2\alpha} \left(q_k - i \frac{p_k}{\omega_k} \right).$$

Соответствующие им операторы примут вид:

$$\hat{g}_k = \frac{1}{2\alpha} \left(q_k + \frac{\hbar}{\omega_k} \frac{\partial}{\partial q_k} \right);$$

$$\hat{g}_k^* = \frac{1}{2\alpha} \left(q_k - \frac{\hbar}{\omega_k} \frac{\partial}{\partial q_k} \right),$$

где по-прежнему

$$\alpha = \sqrt{V\epsilon_0}.$$

Обычно пользуются нормированными операторами \hat{a}_k , \hat{a}_k^* , связанными с операторами \hat{g}_k , \hat{g}_k^* соотношениями:

$$\hat{g}_k^* \hat{g}_k = C_k^2 \hat{a}_k^* \hat{a}_k; \quad \hat{g}_k \hat{g}_k^* = C_k^2 \hat{a}_k \hat{a}_k^*.$$

Тогда перестановочные соотношения для новых операторов примут вид:

$$\hat{a}_k \hat{a}_k^* - \hat{a}_k^* \hat{a}_k = 1$$

или

$$\hat{a}_k \hat{a}_k^* = 1 + \hat{a}_k^* \hat{a}_k. \quad (3-30)$$

Отсюда следует, что произведения $\hat{a}_k^* \hat{a}_k$ и $\hat{a}_k \hat{a}_k^*$, равные

$$\hat{a}_k^* \hat{a}_k = n_k; \quad \hat{a}_k \hat{a}_k^* = n_k + 1,$$

являются не чем иным, как собственными значениями операторов соответственно $\hat{a}_k^* \hat{a}_k$ и $\hat{a}_k \hat{a}_k^*$.

Число фотонов, излучаемых и поглощаемых осцилляторами поля, является односторонней его характеристикой, а именно характеристикой его корпускулярных свойств. Другой его характеристикой, чисто волновой, являются значения мгновенной фазы колебаний осцилляторов φ_k . Для учета этого свойства вводят так называемый оператор фазы $\hat{\varphi}$, связывая его с операторами \hat{a} и \hat{a}^* следующим образом:

$$\hat{a} = e^{i\hat{\varphi}} \sqrt{\hat{n}}; \quad \hat{a}^* = \sqrt{\hat{n}+1} e^{-i\hat{\varphi}},$$

Полагаем при этом, что $\hat{\varphi}$ является оператором обычного умножения φ , а \hat{n} — дифференциальным оператором, равным

$$\hat{n} = i \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Записанные в указанном виде операторы $\hat{\varphi}$ и \hat{n} удовлетворяют полученному выше перестановочному соотношению. Воспользуемся операторами вида

$$\hat{\varphi}_k = \varphi; \quad \hat{n}_k = i \frac{\partial}{\partial \varphi_k}.$$

Очевидно, мы имеем дело с функциями состояния $\Psi = \Psi(\varphi)$, данными в φ -представлении. Отсюда нетрудно найти собственные функции и собственные значения оператора \hat{n} .

Из уравнения Шредингера

$$\hat{n}_k \Psi_{n_k}(\varphi_k) = n_k \Psi_{n_k}$$

или

$$i \frac{\partial \Psi_{n_k}}{\partial \varphi_k} = n_k \Psi_{n_k}$$

следует, что функция Ψ_{n_k} (с точностью до постоянного множителя) равна:

$$\Psi_{n_k} = e^{-i n_k \varphi_k}.$$

Для удовлетворения требованию однозначности этой периодической функции необходимо положить n_k равными целым числам ($n_k = 1, 2, 3 \dots$).

Таким образом, собственные значения оператора \hat{n}_k являются не чем иным, как квантовыми числами, фигурирующими в выражении для энергии квантовых осцилляторов, и в то же время числами фотонов, излучаемых каждым радиационным осциллятором:

$$E_k = \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_k.$$

Имея выражения для операторов

$$\hat{a}_k = a^{i\varphi_k} \sqrt{\hat{n}_k}; \quad \hat{a}_k^* = \sqrt{\hat{n}_k} e^{-i\varphi_k},$$

можно установить их действие на функцию состояния

$$\hat{a}_k^* \Psi_{n_k-1} = \sqrt{\hat{n}_k} e^{-i\varphi_k} e^{-i(n_k-1)\varphi_k} = \sqrt{n_k} \Psi_{n_k};$$

$$\hat{a}_k \Psi_{n_k+1} = e^{i\varphi_k} \sqrt{\hat{n}_k} e^{-i(n_k+1)\varphi_k} = \sqrt{n_k+1} \Psi_{n_k}.$$

Отсюда видно, что действие оператора \hat{a}_k влечет за собой увеличение числа фотонов поля на единицу, т. е. характеризует акт излучения фотона, а оператор \hat{a}_k^* , наоборот, уменьшение числа фотонов поля на единицу, т. е. акт его поглощения.

В силу указанных свойств операторы называются соответственно оператором рождения фотонов (\hat{a}^*) и оператором уничтожения фотонов (\hat{a}).

Следует напомнить, что эти операторы в скрытом виде уже фигурировали в задаче о гармоническом осцилляторе, решение которой проводилось матричным методом. В результате мы пришли тогда к следующему соотношению (см. § 3-6, гл. 3):

$$(\omega_0^2 - \omega_{nm}^2) q_{nm} = 0,$$

где ω_0 — частота внешнего поля, ω_{nm} — частота перехода.

Отсюда следовало, что либо $q_{nm} = 0$, либо $\omega_{nm} = \pm \omega_0$.

Таким образом, в нуль обращаются все q_{nm} , за исключением тех, для которых $\omega_{nm} = +|\omega_0|$ и $\omega_{nm} = -|\omega_0|$. Очевидно, эти равенства говорят либо о переходе из n -го состояния в состояние $(n+1)$, связанное с излучением фотона, либо о переходе из n -го состояния в состояние $(n-1)$, что связано с поглощением фотона.

Следовательно, будет справедлива следующая запись:

$$q_{nm} = 0 \text{ при } m \neq n+1;$$

$$q_{nm} \neq 0 \text{ при } m = n \pm 1.$$

Таким образом, можно утверждать, что переходы между любыми двумя несоседними уровнями происходить не могут. Об этом же говорят и полученные выше результаты действия операторов \hat{a}^* и \hat{a} на функцию состояния Ψ_n .

Соотношение неопределенностей для n и φ . Обратимся к последнему вопросу — соотношению неопределенностей, существующему между числом фотонов n и фазой осциллятора φ . Элементарный вывод этого соотношения состоит в следующем. Поскольку

$$E = nh\omega,$$

то для неопределенностей ΔE и Δn можно записать следующее равенство:

$$\Delta E = \Delta n h(\omega).$$

Умножим обе части этого равенства на Δt

$$\Delta E \Delta t = \Delta n h \omega \Delta t.$$

Но известно, что

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{h}{2}.$$

Обозначая

$$\omega \Delta t = \Delta \varphi,$$

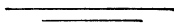
получаем интересующее нас соотношение в виде неравенства:

$$\Delta n \Delta \varphi \geq \frac{1}{2}.$$

Физический смысл этого соотношения заключается в следующем. Первый множитель (Δn) характеризует корпускулярную природу поля, второй ($\Delta \varphi$) — волновую. При малом числе фотонов, т. е. при весьма слабых полях, корпускулярные свойства поля будут существенно превалировать над волновыми и в этом случае неопределенность в числе фотонов может быть доведена до весьма малых величин. Очевидно, что неопределенность по фазе при этом будет значительна, что говорит о некоторой утрате полем своих волновых свойств. Наоборот, при мощных полях, когда число фотонов n огромно, относительная неопределенность Δn становится весьма значительной и неопределенность по фазе может быть резко уменьшена. В этом случае, имея боль-

шую информацию о поле как о волновом процессе, мы утратим представление о нем как о корпускулярном явлении.

В заключение отметим, что если приведенные здесь рассуждения отнести к приему сигналов, то в первом случае речь идет о приеме сигналов в квантовой области, для которой $h\omega \gg kT$ и тогда целесообразно использование приемника дискретного характера, типа счетчика фотонов. Второй случай относится к приему сигналов в классической области, для которой $h\omega \ll kT$ и где используются обычные приемники волнового типа.



ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Г. Басов и А. М. Прохоров, ЖЭТФ, т. 28, 1955, стр. 249.
2. Н. Г. Басов, О. Н. Крохин, Ю. М. Попов, Генерация, усиление и индикация оптических излучений, УФН, т. 72, октябрь, 1960.
3. Д. И. Блохинцев, Основы квантовой механики, изд-во «Высшая школа», 1963.
4. Д. Бом, Квантовая теория, Изд-во иностр. лит., 1965.
5. М. Борн, Атомная физика, изд-во «Мир», 1965.
6. Л. де Бройль, Революция в физике, Атомиздат, 1963.
7. Вейлстеке, Основы теории квантовых усилителей и генераторов, Изд-во иностр. лит., 1963.
8. Витке, Молекулярное усиление и молекулярная генерация на СВЧ, сборник «Миллиметровые и субмиллиметровые волны», Изд-во иностр. лит., 1959.
9. В. Гайтлер, Квантовая теория излучения, Изд-во иностр. лит., 1956.
10. М. Гарбуни, Физика оптических явлений, изд-во «Энергия», 1967.
11. Л. С. Гуткин, Современная радиоэлектроника и ее проблемы, изд-во «Советское радио», 1968.
12. Г. Герцберг, Атомные спектры и строение атомов, Изд-во иностр. лит., 1948.
13. А. С. Давыдов, Квантовая механика, Физматгиз, 1963.
14. Д. Р. Зингер, Мазеры, Изд-во иностр. лит., 1961.
15. А. Зоммерфельд, Строение атома и спектры, т. I и III, Технотеоретиздат, 1956.
16. А. Н. Изнар, Б. Ф. Федоров, Оптические квантовые приборы в военной технике, изд-во «Сов. радио», 1964.
17. Ю. Л. Климантович, Квантовые генераторы света и нелинейная оптика, изд-во «Просвещение», 1966.
18. М. А. Ковнер, М. Л. Кац и др., Оптические квантовые генераторы, изд. Саратовского университета, 1964.
19. Ф. А. Королев, Теоретическая оптика, изд-во «Высшая школа», 1966.
20. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963.
21. Б. А. Лъендъел, Лазеры, изд-во «Мир», 1964.
22. Г. Маркс, Введение в квантовую механику, изд. АН Венгрии, Будапешт, 1962.
23. А. Л. Микаэлян, М. Л., Тер-Микаэлян, Ю. Г. Тур-

ков, Оптические генераторы на твердом теле, изд-во «Сов. радио», 1967.

24. Л. Л. Мясников, Квантовая электроника на судах, изд-во «Судостроение», 1966.

25. Дж. Пирс, Квантовая электроника, изд-во «Мир», 1967.

26. А. М. Прохоров, ЖЭТФ, вып. 6, 1958, стр. 1658.

27. В. К. Семенченко, Избранные главы теоретической физики, изд-во «Просвещение», 1966.

28. А. Сигмен, Мазеры, изд-во «Мир», 1966.

29. А. А. Соколов и др., Квантовая механика, изд-во «Просвещение», 1965.

30. Г. Троуп, Квантовые усилители и генераторы, Изд-во иностр. лит., 1961.

31. В. М. Файн и Я. И. Ханнин, Квантовая радиофизика, изд-во «Сов. радио», 1965.

32. Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс, Фейнмановские лекции по физике, вып. 3, 8 и 9, изд-во «Мир», 1965.

33. Э. Ферми, Квантовая механика, изд-во «Мир», 1965.

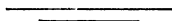
34. В. А. Фок, Квантовая физика и строение атома, изд-во ЛГУ, 1965.

35. С. Э. Фриш, Оптические спектры атомов, Физматгиз, 1963.

36. А. Р. Хиппель, Диэлектрики и волны, Изд-во иностр. лит., 1960.

37. Л. Шифф, Квантовая механика, Физматгиз, 1963.

38. Э. В. Шпольский, Атомная физика, ч. 1, Физматгиз, 1963.



О Г Л А В Л Е Н И Е

От редактора	3
Предисловие	4
Введение. История вопроса	7
Глава первая. Элементарная теория взаимодействия поля излучения с веществом. Принципы действия квантовых приборов	21
1-1. Спектр излучения абсолютно черного тела	21
1-2. Коэффициенты Эйнштейна	32
1-3. Общая характеристика явлений поглощения и излу- чения	35
1-4. Нарушение равновесного состояния квантовых си- стем	40
1-5. Усиление излучения с помощью квантовых систем	46
1-6. Молекулярный генератор	49
1-7. Парамагнитный электронный резонанс	57
1-8. Релаксационные процессы в парамагнитных кристал- лах	59
1-9. Парамагнитный усилитель	70
1-10. Индуцированное излучение в оптическом диапазоне	76
1-11. Оптический квантовый генератор (лазер)	83
1-12. О единстве принципа электронного усиления	97
Глава вторая. Основные принципы и методы квантовой механики	99
2-1. Корпускулярно-волновая природа микрочастиц	99
2-2. Соотношения неопределенностей	102
2-3. Особенности измерения квантовых систем	108
2-4. Основное уравнение квантовой механики (уравнение Шредингера)	112
2-5. Волновая функция	118
2-6. Статистические ансамбли квантовых систем	124
2-7. Квантование фазового пространства микрочастицы	128
2-8. Ансамбли из ферми-частиц и бозе-частиц	130
2-9. Операторы в квантовой механике	137
2-10. Оператор момента количества движения	145
2-11. Классическое волновое уравнение и уравнение Шре- дингера	147
2-12. Движение частицы в неограниченном пространстве	151
2-13. Движение частицы в ограниченной области простран- ства	160
	263

2-14. Водородоподобный атом	167
2-15. Элементы теории представлений	174
2-16. Основные идеи и принципы матричной механики	177
2-17. Некоторые сведения из матричной алгебры	181
2-18. Применение матричного метода к задачам квантовой механики	182
2-19. Функция действия и основные уравнения аналитической механики	186
2-20. Уравнения движения квантовой механики в шредингеровом и гейзенберговом представлениях	189
2-21. Понятие о статстической матрице (матрице плотности)	192
Глава третья. Введение в теорию взаимодействия квантовых систем с электромагнитным полем	197
3-1. Общая характеристика задачи взаимодействия поля с веществом	197
3-2. О методе теории возмущений	201
3-3. Взаимодействие квантовой системы с постоянным полем	205
3-4. Взаимодействие атома водорода с постоянным полем	209
3-5. Классический линейный осциллятор	216
3-6. Квантовый линейный осциллятор	223
3-7. Сравнение классического и квантового осциллятора	233
3-8. Атом как квантовый излучатель	236
3-9. Вычисление вероятности переходов при взаимодействии атомов с электромагнитным полем	244
3-10. Представление свободного электромагнитного поля совокупностью радиационных осцилляторов	249
3-11. Квантование свободного электромагнитного поля (вторичное квантование)	251
Литература	261

Цена 69 коп.