

Д. БОМ
КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ

В книге систематически изложена нерелятивистская квантовая механика. Автор детально разбирает физическое содержание и подробно рассматривает математический аппарат одного из самых важных разделов современного естествознания — атомной теории. Книга написана простым и доходчивым языком. Все это делает книгу очень полезной для читателя, начинающего знакомиться с квантовой механикой.

Рассчитана на инженеров и научных работников, а также на студентов и аспирантов, специализирующихся в области физики и физико-химии.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора перевода	7	функции	
Из предисловия автора,	9	ЧАСТЬ III	
ЧАСТЬ I		ПРИЛОЖЕНИЯ К ПРОСТЫМ	
ФИЗИЧЕСКОЕ СОДЕРЖАНИЕ		СИСТЕМАМ. ДАЛЬНЕЙШИЕ	
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ		ОБОБЩЕНИЯ ФОРМУЛИРОВКИ	
Глава 1. Возникновение	14	КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ	
квантовой теории		Глава 11. Решение волнового	275
Глава 2. Дальнейшее развитие	35	уравнения для прямоугольных	
старой квантовой теории		потенциалов	
Глава 3. Волновые пакеты и	77	Глава 12. Классический предел	312
волны де Бройля		квантовой теории. Приближение	
Глава 4. Определение	103	ВКБ	
вероятностей		Глава 13. Гармонический	348
Глава 5. Соотношение	124	осциллятор	
неопределенностей		Глава 14. Момент количества	363
Глава 6. Волновые и	144	движения и волновое уравнение	
корпускулярные свойства		в трех измерениях	
материи		Глава 15. Решение радиального	390
Глава 7. Сводка основных	172	уравнения; атом водорода;	
квантовых представлений		влияние магнитного поля	
Глава 8. Попытка построения	176	Глава 16. Матричная	420
физической картины квантовой		формулировка квантовой теории	
природы материи		Глава 17. Спин и момент	450
ЧАСТЬ II		количества движения	
МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ		ЧАСТЬ IV	
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ		МЕТОДЫ ПРИБЛИЖЕННОГО	
Глава 9. Волновые функции,	210	РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ	
операторы и уравнение		ШРЁДИНГЕРА	
Шрёдингера		Глава 18. Теория возмущения,	472
Глава 10. Флуктуации,	240	зависящего и не зависящего от	
корреляции и собственные		времени	

Глава 19. Возмущения в случае вырожденных систем	535
Глава 20. Внезапные и адиабатические возмущения	573
ЧАСТЬ V	
ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ	
Глава 21. Теория рассеяния	589
ЧАСТЬ VI	

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ПРОЦЕССА ИЗМЕРЕНИЯ	
Глава 22. Квантовая теория процесса измерения	668
Глава 23. Соотношение между квантовым и классическим представлениями	714
Литература	719
Алфавитный указатель	722

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Абсолютно черное тело	15
— — —, равновесное излучение	14, 53
— — —, распределение энергии	31
Адиабатическое включение потенциала	521
— возмущение	573
— — —, примеры	579—586
— приближение	548
Адиабатической инвариантности критерий	582
Альфа-распад ядра	287
— — —, коэффициент прозрачности барьера	288
— — —, приближение ВКБ	289
— — —, среднее время жизни ядра	288
Анализ и синтез	199
Антисимметричность волновых функций электронов	564
Атом водорода	390, 392, 473
— — —, вырождение энергетических уровней	406
— — —, общая форма решения	394
— — —, точное решение	402—405
— — —, энергетические уровни	405
Атомный структурный фактор	633
Бесселя функции	646
— — —, асимптотическая форма	644
Бета-распад, испускание электронов из ядра	587
Бибермана, Суцкина и Фабриканта опыты	144, 165

Био — Савара закон	563
Бозе — Эйнштейна статистика	572
Бора магнетон	418
Бора — Зоммерфельда квантовое условие	57, 60, 90 и д.
Борновское приближение	613—618, 629
— — — в оптике	629
— — —, критерий применимости для прямоугольной потенциальной ямы	637
— — —, неприменимость при рассеянии на ядрах	638
— — —, применение к случаю экранированного кулоновского рассеяния	635, 636
— — —, рассеяние от кристаллической решетки	632—634
— — —, связь с коэффициентами разложения потенциала в ряд Фурье	619
— — —, условие применимости	634
Боровский радиус	60
Брэгга — Вульфа уравнение	91
— условия	633
Ван-дер-Ваальса сила	547—553, 555, 583
Вариации постоянных метод	472-475, 588
Вековое (секулярное) уравнение	431
Векторный потенциал	17, 414
— — — и интенсивность излучения	488

- — плоской волны 107
- —, разложение в ряд Фурье 22
- Вероятность 103
- , плотность 103, 104, 106, 240
- , сохранение 104
- , ток 105, 123
- Вещественность средних значений и порядок сомножителей 222
- Вильсона камера 147, 148, 199
- —, волномеханическое объяснение следов 167—169
- Вина закон 15
- Виртуальный, или метастабильный, уровень 310, 337, 347
- ВКБ приближение 88, 275, 313 и д.
- — в трехмерном случае 318
- —, виртуальные, или метастабильные, состояния 334, 337
- — как асимптотическое разложение 316
- —, проникновение через барьер 320—327
- —, радиоактивный распад 328
- —, связанные состояния потенциальной ямы 331
- —, холодная эмиссия электронов из металла 327, 328
- Возмущение волновых функций стационарного состояния 523
- Возмущений теория 473, 479, 613
- — и теория внезапных переходов 588
- —, применения 529 Волновая функция 90, 96 и д.
- — вещественная 109, 111
- —, влияние процесса наблюдения 149
- — двух частиц 211
- —, комплексная 107, 111
- —, критерий пригодности 216
- —, матричное представление в виде столбца 428, 429
- — полная, интерпретация с помощью статистического ансамбля волновых функций только спина 690—692
- Волновое уравнение 99 и д.
- — в трех измерениях 363
- — для двух взаимодействующих частиц
- — — свободной частицы 100
- —, приближенное решение 317
- Волновой вектор 22
- пакет 79 и д.
- — вблизи резонанса 343
- —, образование 341, 402
- —, распывание для свободной частицы 243
- —, скорость групповая 84, 101
- —, — сигнала 84
- Волновой пакет, скорость фазовая 84
- формализм и вероятность 210
- Волновые и корпускулярные свойства вещества как потенциальные возможности 697
- пакеты как континуум собственных функций 305
- функции гармонического осциллятора 425
- Вырожденный оператор 254
- Гамильтона оператор 237, 268, 274 и д.
- —, собственные функции 270, 272, 276
- уравнения 26
- функция 236, 304, 365, 414
- Гамильтона — Якоби уравнение 319
- Гамильтониан в сферических координатах 365
- , влияние спина 562—564
- заряженной частицы в электромагнитном поле 414
- — — — — квантовомеханический 415

- Гармонический осциллятор 331, 348—362
- —, волновое уравнение 348
- —, — —, методы точного решения 350
- —, — —, общая форма решений 349
- —, — —, шрёдингеровский метод факторизации 350
- —, потенциал 331
- —, трехмерный 409, 497, 543
- — —, вырождение энергетических уровней 411, 535
- — —, уравнения Шрёдингера 410
- Гаусса функция нормированная 255
- —, расиределения 249
- Гауссовская волновая функция 250
- — —, особые свойства 250
- Гипергеометрическая функция 663
- —, вырожденная 407
- Градиентная инвариантность 416, 417
- Градиентное преобразование 18, 416, 417
- —, исключение скалярного потенциала 417
- —, однородное магнитное поле 417
- Грина теорема 626
- функция 626
- —, свойства 626
- Гюйгенса принцип 149, 159, 211
- Де Бройля волны 77, 78, 90, 139
- —, длина волны 189, 304, 313
- —, соотношение 46, 50, 78 и д.
- Действия переменная 335, 578
- функция 317, 319
- Дейтрон 302, 305
- , уровни энергии 394
- , энергия связи 302
- Детерминизм классический 39
- Диагональное представление операторов 426
- Дирака дельта-функция 256. 263, 427
- —, дифференцирование 259
- —, нормировка 256, 428
- —, разложение в ряд 265
- релятивистское волновое уравнение 113, 470
- Дискретность квантовых процессов 39
- Доплеровское смещение 49 и д.
- Дополнительности принцип 193—196, 209
- Дуализм корпускулярно-волновой 173, 174
- Дэвиссона — Джермера опыт 78, 91 и д.
- —, объяснение Дьюэна 92, 164
- Естественная ширина линии 272
- Закон сохранения энергии 283
- Зеемана эффект 407, 419, 450, 518
- —, аномальный 515
- —, нормальный 513
- — —, квантовое описание 514
- Зеемановское расщепление энергетических уровней 417
- Зенона парадоксы 180
- Излучение индуцированное, или вынужденное 491, 492
- магнитное дипольное 505
- — —, правила отбора 506
- самопроизвольное 492
- — по Эйнштейну 492
- электрическое квадрупольное 504
- — —, правила отбора 505
- Измерение мгновенное 677
- , необратимость и роль его в квантовой теории 696
- , разрушение интерференционной картины 687
- спина атома 679
- Измерительная аппаратура 668
- —, классические свойства 669—671
- —, ошибка измерения 669

- —, связь с состоянием системы 669
- Импульс 189, 190, 191
- отдельной частицы 188
- света («пуг волн») 78
- силы 188
- Импульсное представление 219
- Интерференция вероятностей 269
- Ионизации потенциал 63
- Испускание излучения 72
- Калибровочное, или градиентное, преобразование 18
- Канонически сопряженные переменные 195
- Канонические уравнения 414
- Канонический импульс 414
- Каноническое преобразование 386, 544
- Квадрупольный момент заряда 504
- Квантование атомных систем 53
- момента количества движения 57
- осцилляторов вещества 32
- — излучения 30
- электрона в атоме водорода 58
- Квантовое состояние 213, 214, 691
- —, статистический смысл 213
- число азимутальное 63, 372
- — главное 61, 398, 400
- — магнитное 372, 400, 418
- — орбитальное 372, 400
- — полного момента 372
- — радиальное 61
- Квантовомеханическая аналогия фазы осциллятора 553
- Квантовомеханический резонанс 541
- Квантовый переход 477
- Кватернион 460
- Кейли — Клейна параметры 460
- Керра эффект 40
- ячейка (конденсатор) 40
- Классический предел квантовой теории 312 и д.
- Колебания вынужденные 520
- свободные 520
- Коммутативность диагональных матриц 426
- Коммутатор 221, 231. 438, 445
- двух матриц 422
- Коммутация матриц 422
- Комптона эффект 47 и д.
- Комптоновская длина волны электрона 48
- Константы движения 367
- Координатное представление 219, 221, 222
- Корреляция 240, 241
- , квантовое определение 243
- , количественная мера в классической теории 242
- , физическое описание причин 708—712
- Кroneckera символ 423
- Кулоновский потенциал 392, 396
- —, специфические свойства 638
- —, сравнение классического и борновского приближений 637, 638
- Кюри точка 566
- Лагерра полиномы 407
- присоединенные полиномы 407
- Лапласа оператор 18, 19, 363
- уравнение 19
- Лармора прецессия 513
- частота 513, 582
- Лауренса и Бимса опыт 40
- Лебедева опыт 46
- Лежандра полиномы 375, 388. 641, 646
- —, дифференциальное уравнение 376
- —, нормировка 376
- —, ортогональность 376
- —, постулат разложения 377
- —, производящая функция 377
- —, рекуррентные формулы 377
- —, узлы 378

- присоединенные функции 378
- — —, дифференциальное уравнение 379
- — —, нормировка 379
- — —, общая форма 380
- — —, поверхностные гармоники 379
- — —, число узлов 381
- Линейное преобразование 429
- Линейной суперпозиции гипотеза 211, 232
- Линейность операторов 220
- Лоренца преобразование 112
- Магнетомеханическое отношение 450
- Максвелла уравнения 17 и д.
- Максвелла — Больцмана распределение скоростей 28
- статистика 493
- Максвелловский «демон» 696
- Матрица 420
- , диагональная 423
- , единичная 423
- , обратная 424
- , свойства 421
- , след, или шпур 436
- , унитарная 433
- , элемент, или компонента 421
- эрмитовская 425
- эрмитовски сопряженная 425
- Матрицы, собственные векторы 431
- , — значения 431
- Матричная формулировка квантовой теории 420
- Матричное представление квантовомеханических операторов 424
- Метастабильное ядро 346, 347
- Метастабильные (виртуальные) состояния микрочастицы в потенциальной яме 309, 334
- Микроскоп оптический 130, 283
- протонный 138, 165
- электронный 130, 135
- Микроскопическая обратимость квантовых процессов 482
- — классических движений 482
- Многих частиц задача 250
- Момент количества движения 363, 450
- — — в полярных координатах 366
- — —, оператор 363, 365
- — —, —, перестановочные соотношения 365
- — —, сложение 461
- Мотта формула рассеяния 666
- Невырожденный оператор 255
- Неопределенностей соотношение 81, 97, 124 и д.
- — для электронов 125
- — — энергии и времени 125, 133
- — и некоторые формы нашего мышления 205
- —, общий вывод 246
- —, объяснение энергетических уровней 303
- Неопределенности принцип 124
- Непрерывность движения частиц в классической физике 177
- и дискретность квантовых представлений 698, 699
- Непрерывные матрицы 426
- Неразличимость эквивалентных частиц 570—572
- Неунитарное преобразование 434
- Ньютона законы движения 13, 41, 43, 234
- уравнения 238, 313
- Обменная энергия 559, 565, 567
- Обменное вырождение 555—557, 559
- Обменный интеграл 559
- Оператор 210, 232
- антиэрмитовский 227
- в пространстве импульсов 219
- — — координат 219
- вырожденный 254

- для вычисления средних значений импульса 217
- , линейность 220
- , матричное представление 420
- момента количества движения 363, 365
- — —, матричное выражение 451
- — — — собственные значения 368, 369
- — — —, — функции 368, 369, 373
- невырожденный 255
- , представление через собственные функции 266
- , собственная функция 252
- , собственное (характеристическое) значение 252
- , среднее значение 430
- , эрмитизация 225
- эрмитовски сопряженный 226—230
- — —, обобщенное определение 229
- эрмитовский 223
- —, обобщенное определение 228
- —, ортогональность собственных функций 263
- —, теорема о вещественности собственных значений 263
- Операторная форма функций общего вида 221
- Ортоводород 659
- Ортогональности условия 21
- Ортогональность 21, 430
- Осциллятор ангармонический 55
- гармонический 24, 25, 55
- —, гамильтониан 25
- излучения 17, 417
- Параводород 659
- Параметр столкновения, или удара 592, 595, 608
- Парциальная волна 641
- Парциальных волн метод 641
- — — для свободной частицы 643—647
- — —, интерпретация для р-волн 645
- — —, — — s-волн 644
- — —, применение для случая ядерного рассеяния 655—662
- — —, случай кулоновского потенциала 642, 662
- Паули матрицы 455
- —, перестановочные соотношения 455
- принцип запрета 558, 565, 569
- Паули — Вайскопфа метод 114
- Пашена — Бака эффект 419
- Переменная действия 56
- Переход виртуальный 481, 486
- действительный 481
- Планка гипотеза 30, 36, 38
- постоянная 16, 36
- функция распределения 31, 69
- Плотность вероятности 103 и д.
- — для кванта света 114, 115
- Поглощение излучения 67
- Пойнтинга вектор 114, 488
- Полная система наблюдаемых величин 438
- Полное внутреннее отражение 283, 341
- Полностью симметричные волновые функции 569
- Полный момент количества движения 366, 372
- — —, векторное изображение 372
- Поляризации направление 23
- Поляризация круговая 511
- эллиптическая 511
- Поляризуемость атомов 532—534, 550
- Поперечное сечение для гауссовского потенциала и прямоугольной ямы 620

- — — передачи энергии и импульса 599
- — — рассеяния 590, 591
- — — дифференциальное 593
- — —, зависимость от угла рассеяния 591
- — — полное 592, 593
- Потенциал прямоугольный 277, 278
- —, коэффициент прозрачности барьера 280
- —, отражательная способность барьера 280
- Потенциальный барьер 196
- Правила отбора 470, 498
- — дипольных переходов 503
- — для гармонического осциллятора 498
- — — сферически симметричного потенциала без учета спина 501
- — — четности 500
- —, связь с принципом соответствия 498
- Правило сумм для вычисления матричных элементов 510
- Представление гамильтоновское 441
- гейзенберговское 441, 442
- импульсное 219
- координатное 219
- Шрёдингера 442
- энергетическое 441
- Преобразование каноническое 436
- Приведенная масса 394, 418, 604
- энергия 604
- Прицельное расстояние 592
- Причинность и механический детерминизм 183
- механическая (динамическая) 39
- приближенная и статистическая 185
- Проникновение через барьер 285
- — —, коэффициент отражения 287
- — —, — прозрачности 286

- Прямоугольная потенциальная яма 289
- — —, коэффициент отражения 292
- — —, — прозрачности 291, 292
- Прямоугольный потенциальный барьер 276
- Пуассона скобки 444—446
- уравнение 18, 19
- Работа 186
- выхода 327
- Равномерное распределение энергии по степеням свободы 29
- Радиальное уравнение 390, 412, 418
- Различия между классическими и квантовыми законами 39
- Разложение δ -функции 358
- произвольной функции в ряд по собственным функциям 262
- Разложения постулат 263, 268, 358, 436
- —, применение к оператору Гамильтона для прямоугольной потенциальной ямы 301
- Рамзауера эффект 293, 653, 654
- Рассеяние в координатном представлении 623
- — — и импульсном представлении 629, 630
- кулоновское 601
- на экранированном кулоновском потенциале 618
- Рассеяния теория квантовая 607
- — классическая 589
- — —, условие применимости 607
- угол 592
- Резерфорда формула 601, 602, 618
- Резонанс прозрачности 293, 338, 654
- —, ширина 292, 338
- Резонансный переход энергии 552
- Релятивистские теории 112
- Ридберга постоянная 60

Ридберга — Ритца комбинационный принцип 54, 75
 Рэлея — Джинса закон 14 и д.
 Свет. волновая природа 37, 38
 —, корпускулярные свойства 45
 —, локализованные частицы 37, 38
 Световая волна 36
 Свободного пробега распределение длин 591
 — — средняя длина 590 s-волны 391, 644
 —, общая форма решения 395
 Связанное состояние 294, 301
 — — в прямоугольной потенциальной яме 349
 — —, энергия связи 302
 Сила 190
 Синглетное состояние дейтрона 310
 Скалярный потенциал 17, 414
 Скрытые параметры 43. 127, 207
 — —, их существование 142
 — —, несовместимость их с квантовой теорией 712
 Слейтера детерминант 568, 569
 Сложение моментов количества движения 461
 — — —, общая задача 469
 — орбитального и спинового моментов 466
 — спинов 462
 Собственные значения в координатном пространстве 253
 — — — — —, оператор x 255
 — — — — —, — импульса 253
 — — — — —, — энергии 254
 — — оператора x в импульсном представлении 258
 — — импульса в пространстве импульсов 257
 — — операторов, дискретный и непрерывный спектр 261
 — функции в координатном пространстве 253

Соответствия принцип 43—45 и д.
 — — — и теория излучения 66
 — —, квантование моментов количества движения 58
 Соотношение между квантовым и классическим представлениями 714
 Состояние квантовое 213, 214, 691
 — —, статистический смысл 213
 — системы в квантовой теории 212
 — смешанное 691, 692
 — чистое 691, 692
 Состояния виртуальные, или метастабильные 334
 — истинные связанные 334
 Сохранения вероятности 104, 415
 — энергии закон 239
 Спин 210, 450
 — электрона 112, 211, 450
 — —, связь с обменной энергией 565
 Спинор 95, 460
 —, преобразование 457
 Спин-орбитальная энергия 471
 Спин-орбитальное взаимодействие 471
 Сравнение электронных и электромагнитных волн 95
 Среднее значение функции импульса 215
 — — — координат 214
 Средняя скорость 179
 Статистические законы 186
 Статистический вес 29
 Стационарное состояние 271
 Столкновения второго рода 584
 Ток вероятности 105, 123, 415, 417
 — —, вектор 106
 — —, общее определение 238
 Томаса прецессия 470
 Томсона формула 48
 Тонкая структура 406
 Тяготения закон 185
 Узлы волновой функции 333

- Унитарное преобразование 433, 442, 460
- —, свойства 433—136
- Фабри — Перо интерферометр 291
- Фазовый интеграл 57
- Факторизации метод 350, 403
- Ферми — Дпрака статистика 572
- Ферромагнетизм 567
- Физическая эквивалентность всех систем координат 385
- Флуктуации 240
- Фотон 45, 134, 135
- Фотоэлектрический эффект 35, 53, 172
- Франка — Гертца опыты 38, 65
- Функция антисимметричная 557
- симметричная 557
- Фурье интеграл 99, 217, 426
- интегральная теорема 100
- ряд 99. 264
- —, метод разложения 13, 16, 17
- —, разложение полей 20
- Характеристическая функция 252
- Характеристическое значение оператора 252-
- Центробежный потенциал 391, 395
- Циклотронная частота 513
- Цуг волн 78, 132, 134
- Четность 499
- Шаровые функции 363, 364
- Шварца неравенство 247, 248, 249
- Шмидта ортогонализация 437
- Шрёдингера уравнение 60 и д.
- — в импульсном представлении 613
- — — координатном представлении 440
- — — произвольном представлении 439
- — — сферических полярных координатах 363
- — для свободной частицы 101, 149, 393
- — — электрона 107
- —, общая форма 232
- — трехмерное 318
- Штарка эффект 472, 535, 550
- — в атомах водорода 545, 663
- — — —, отличных от атомов водорода 531
- — квадратичный 532, 545
- — первого порядка 406, 544
- — — —, классическая интерпретация 546
- Штерна и Герлаха двойной опыт 385
- — — опыт 381 и д.
- Эйнштейна и де Бройля соотношение 50, 51
- — Дебая теория теплоемкостей твердых тел 172
- , Розена, Подольского мысленный эксперимент 702—704
- , —, — —, математический анализ 704—708
- , —, — парадокс 700—702
- условие 486
- Электронные волны 88
- Энергия 189
- кинетическая 187
- потенциальная 187
- Энтропия и ее связь с процессом измерения 696
- Эренфеста теорема 236
- Эрмита — Чебышева полиномы 354, 377
- —, порождающая функция 355.
- —, рекуррентные соотношения 356
- —, свойство ортогональности 357
- —, связь со сферическими гармониками 412
- Эффективный, атомный радиус 594
- потенциал 399, 418

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА КО ВТОРОМУ ИЗДАНИЮ

Второе издание перевода настоящей монографии Д. Бома по нерелятивистской квантовой механике является по существу стереотипным. При подготовке этого издания были внесены необходимые исправления всех замеченных опечаток в тексте и в формулах. В некотором весьма небольшом числе случаев произведено изменение неудачных обозначений, а также добавлено несколько новых примечаний редактора. Кроме того, книга снабжена списком важнейших обозначений, которые используются в формулах и в тексте. Наконец, уточнен и несколько расширен список литературы за счет последних работ по теории квантовых измерений.

То, что книга Д. Бома переиздается спустя всего четыре года после выхода в свет первого издания ее перевода, служит достаточно убедительным доказательством популярности этой монографии у советских читателей, интересующихся вопросами современной теоретической физики. Она может быть с должным эффектом использована как учебное и справочное руководство по нерелятивистской квантовой механике широким кругом специалистов.

С. В. Вонсовский

ИЗ ПРЕДИСЛОВИЯ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА К ПЕРВОМУ ИЗДАНИЮ

Настоящая книга по нерелятивистской квантовой механике принадлежит перу известного американского физика Давида Бома. Он известен как автор очень интересных теоретических исследований по теории электронной плазмы, по разработке (в содружестве с Д. Пайнсом) весьма важного метода в теории систем многих взаимодействующих квантовых частиц (так называемого метода коллективного описания взаимодействия) и других работ по теоретической физике, которые характеризуют его как активного творческого исследователя в области квантовой механики.

Предлагаемая вниманию читателя книга Д. Бома несомненно носит ярко выраженные черты оригинальности. Язык ее очень простой и

доходчивый, она написана очень живо и местами увлекательно. Большое внимание в книге уделяется подробному физическому анализу практически всех затронутых вопросов, привлекаются аналогии из других областей естествознания (биологии, физиологии и т. п.). Очень много места уделяется анализу таких важных проблем, как взаимоотношение между квантовой и классической теориями, атомизм микроявлений, корпускулярно-волновой «дуализм» последних, статистический характер квантовых закономерностей и т. п.

Д. Бом известен не только как исследователь проблем квантовой механики, но и как автор работ по философским проблемам современной физики [69*, 70*]. В своих методологических работах он выступает как материалист, стремящийся преодолеть идеалистические заблуждения в интерпретациях основных положений современной квантовой физики, которые, к сожалению, в немалой степени присущи многим крупнейшим зарубежным ученым. На протяжении всей книги Д. Бом подчеркивает объективный характер квантовомеханических законов. Хотя здесь мы и не найдем высказываний последовательного материалиста, владеющего философией марксизма-ленинизма, но, несмотря на это, весьма отраднo, что в серьезном труде, каковым безусловно является эта книга, автор искренне стремится дать материалистическую трактовку важнейшим закономерностям микроявлений, хотя во многом и с позиций стихийного материалиста.

Д. Бом детально разбирает физическое содержание квантовой механики, приводя подробные математические выкладки. Однако последние всегда носят подчиненный характер иллюстраций и примеров к основному физическому разбору закономерностей микроявлений. При этом он всегда придерживается большой математической строгости и никогда не допускает вульгаризаций или грубого упрощения. Все это делает книгу Д. Бома полезной именно для начинающего читателя, желающего глубоко изучить как физическое содержание, так и математический аппарат одной из самых важных и увлекательных глав естествознания — атомной теории.

При переводе книги Д. Бома и его редактировании переводчик и редактор стремились повсюду сохранить оригинальный стиль изложения и терминологию автора. Лишь в некоторых случаях мы позволили себе несколько изменить терминологию автора, поскольку она не принята в советской литературе по квантовой механике, а также снабдить книгу некоторым количеством примечаний, главным образом там, где даются те или иные философские трактовки конкретного материала. В списке литературы добавлено некоторое количество ссылок на книги, аналогичные приведенным автором, а также на работы советских ученых, дополняющие изложение Д. Бома или дающие несколько иную интерпретацию некоторых вопросов теории.

С. В. Вонсовский

Квантовая теория является результатом длительных и успешных попыток физиков правильно истолковать чрезвычайно обширную область опытных данных, к объяснению которых существовавшая ранее классическая теория не смогла даже приступить. Однако это не означает, что квантовая теория дает радикальное изменение не только содержания научных знаний, но также и основных понятий, с помощью которых эти знания выражаются. Возможно, подлинная степень этих изменений основных понятий затемняется контрастом между относительно наглядными и легко изображаемыми представлениями, которыми всегда пользуются в классической теории, и очень абстрактной математической формой, в которой получила свое первоначальное развитие квантовая механика. Контраст при этом настолько велик, что значительное число физиков пришло к следующему выводу: нужно отказаться от мысли понять квантовые свойства материи в привычных образах и удовлетвориться только последовательным математическим формализмом, который может некоторым мистическим путем правильно предсказывать численные результаты фактических экспериментов. Тем не менее с дальнейшим развитием физического истолкования теории (главным образом в результате работ Нильса Бора) в конце концов стало возможным выразить результаты квантовой теории с помощью качественных и сравнительно наглядных представлений, которые, однако, имеют совершенно иную природу, чем представления классической теории. Главной задачей этой книги и является дать такую сравнительно элементарную формулировку квантовой теории.

Точное содержание новых квантовомеханических понятий будет излагаться на протяжении всей книги, особенно в гл. 6, 7, 8, 22 и 23, но наиболее важные изменения понятий можно кратко привести и здесь. Во-первых, классическое понятие о непрерывной и точно определенной траектории в корне изменяется введением описания движения в виде ряда квантовых переходов. Во-вторых, грубый детерминизм классической теории заменяется понятием причинности как приблизительной и статистической закономерности. В-третьих, классическое допущение, что элементарные частицы имеют «присущую

им» неизменную природу, заменяется допущением, что они могут проявлять себя или как волны, или как частицы в зависимости от воздействия окружающей среды. Применение этих трех новых представлений приводит к отказу от допущения, которое лежит в основе многих наших обычных высказываний и представлений, а именно, что можно анализировать отдельные части вселенной, каждая из которых существует самостоятельно, но которые при совместном действии в соответствии с точными причинными законами образуют целое. Вместо этого по квантовым понятиям вселенная существует как единое неделимое целое, в котором даже «внутренняя» природа каждой части (волны или частицы) зависит в некоторой степени от ее взаимоотношения с окружающей средой. Однако только в микроскопических (или квантовых) масштабах неделимость целого различных частей вселенной дает значительные эффекты, тогда как в макроскопических (классических) масштабах отдельные части с очень высокой степенью приближения действуют так, как если бы они имели полностью самостоятельное существование.

Автор стремился изложить основные представления квантовой теории в нематематической форме. Однако опыт показывает, что необходима некоторая доза математики, чтобы выразить эти представления в более определенной форме и чтобы показать, как решаются типичные задачи квантовой теории. Поэтому книга построена так, что большое количество частных применений с подробными решениями дополняет основные качественные и физические представления о главных принципах теории.

В соответствии с только что указанным общим планом необычным является особое внимание к вопросу (особенно в части I), как можно естественным путем построить квантовую теорию из ранее существовавшей классической теории и как постепенно экспериментальные факты и теоретические соображения привели к замене классической теории квантовой. Идя таким путем, мы избежали необходимости введения основных принципов квантовой теории в виде полной системы абстрактных математических постулатов, подтверждаемых только тем фактом, что сложные вычисления, основанные на этих постулатах, могут совпасть с экспериментом. Хотя принятое в этой книге изложение, возможно, и не столь изящно математически, как аксиоматическое изложение, но оно имеет тройное преимущество. Во-первых, оно более ясно показывает, почему требуется столь радикально новый тип теории. Во-вторых, оно позволяет лучше уяснить физический смысл теории. В-третьих, оно более гибкое по структуре своих понятий, ибо в этом случае легче увидеть, как можно сделать небольшие изменения в теории, если не получается немедленно полного согласия с экспериментом.

Хотя качественный и физический анализ квантовой теории проводится главным образом в частях I и VI, но на протяжении всей

книги автор стремился систематически объяснять результаты математических вычислений с помощью качественных и физических представлений. Кроме того, мы надеемся, что математика здесь достаточно упрощена, чтобы дать возможность читателю следить за общей линией рассуждений, не проводя слишком много времени над разбором математических вычислений. Наконец, следует отметить, что относительное уменьшение акцента на математический аппарат теории не ставило своей целью уменьшить количество размышлений, необходимых для полного понимания теории. Наоборот, мы надеемся, что у читателя будет стимул к более глубокому продумыванию, и он усвоит более общую точку зрения, которая послужит ему для ориентации при дальнейшем изучении этой интереснейшей области науки.

Значительная часть материала этой книги была составлена по лекциям профессора Оппенгеймера, читанным им в Калифорнийском университете в Беркли, и по замечаниям к этим лекциям профессора Петерса. Лекции Нильса Бора «Атомная теория и описание природы» сыграли решающую роль в общем философском обосновании, необходимом для правильного понимания квантовой теории.

ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

ν — линейная частота	v_g — групповая скорость
$\omega = 2\pi\nu$ — циклическая частота	v_p — фазовая скорость
c — скорость света	$\psi(\mathbf{r})$ — волновая функция
T — температура или коэффициент прозрачности	$\varphi(\mathbf{k})$ — волновая функция (импульсное представление)
α — постоянная Больцмана	E — энергия
h — постоянная Планка	S — ток вероятности, вектор Пойнтинга–Умова
$\hbar$ — постоянная Дирака	$S(r, t, E)$ — функция действия
$\mathcal{E}$ — напряженность электрического поля	O, O^* — символ произвольного оператора
$\mathcal{H}$ — напряженность магнитного поля	$\bar{F}$ — средняя флуктуация
$d\tau, d\mathbf{r}$ — элемент объема	C_{nm} — функция корреляции
t — время	$\delta(r)$ — дельта-функция Дирака
$\mathbf{i}$ — вектор плотности тока	Ze — заряд ядра
ρ — плотность заряда	$h_n(y)$ — полином Эрмита–Чебышева
A — вектор-потенциал	Ω — угловая часть оператора Лапласа
φ — скалярный потенциал, азимут	$Y(\theta, \varphi)$ — шаровая функция
$\mathbf{k}$ — волновой вектор	$\mathbf{L} = [\mathbf{r}, \mathbf{p}]$ — момент количества движения
M — масса протона	p_r — радиальный импульс
$\mathbf{p}(p_1, p_2, p_3)$ — вектор импульса	m — магнитное квантовое число
$\mathbf{q}(q_1, q_2, q_3)$ — радиус-вектор	l — орбитальное квантовое число
$\mathbf{r}(x, y, z)$ — радиус-вектор	$P_l(\zeta)$ — полином Лежандра
H — гамма-тонна	$P_l^m(\zeta)$ — присоединенная функция Лежандра
W, R, P — символы вероятности	$L_r(\rho)$ — полином Лагерра
F — сила	$L_r^s(\rho)$ — присоединенная функция Лагерра
$\tau = \frac{2\pi}{\omega}$ — период	(a_{mn}) — символ матрицы
J — переменная действия	δ_{ji} — символ Кронекера
$V(q), V(x)$ — потенциальная энергия	σ — поперечное сечение
e — заряд электрона	$J_n(kr)$ — функция Бесселя
Z — порядковый номер элемента	$S(\theta)$ — интегральное поперечное сечение
R — постоянная Ридберга или отражательная способность	$q(\theta)$ — дифференциальное поперечное сечение
a_0 — радиус боровской орбиты	μ — магнетон Бора
n — главное квантовое число	
I — интенсивность излучения	
$n(\lambda)$ — показатель преломления	

ФИЗИЧЕСКОЕ СОДЕРЖАНИЕ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

Необходимо отметить две особенности современной квантовой теории. Во-первых, она содержит ряд физических представлений, которые совершенно не похожи на большинство наших повседневных представлений, а также на большинство опытов макроскопической физики. Во-вторых, математический аппарат, необходимый для применения этой теории, даже в простейших случаях значительно сложнее аппарата, используемого в соответствующих задачах классической физики. Последнее обусловлено стремлением представить квантовую теорию как нечто неотделимое от математических задач, которые возникают при ее применениях. Такой подход можно уподобить тому, как если бы при изучении элементарной физики начали трактовать законы движения Ньютона как задачу теории дифференциальных уравнений. В книге особое внимание уделяется изложению основных физических принципов, полезных не только тогда, когда необходимо применить теоретические представления к новой проблеме, но также и в тех случаях, когда желательно выяснить общие свойства математических решений, не прибегая к подробным вычислениям. Изложение специального математического аппарата, необходимого для получения количественных результатов в сложных задачах, должно в основном приводиться или в математических курсах, или в специальных курсах, связанных с математическим аппаратом квантовой теории. Однако совершенно невозможно последовательно изложить квантовую теорию без использования методов разложения в ряд Фурье. Поэтому предполагается, что читатель в основном знаком с соответствующим разделом курса математического анализа.

В первой части очень большое внимание уделяется изложению ранних этапов развития квантовой теории, начиная с классической теории, а также описанию специальных опытов, которые привели к замене классической теории квантовой. Эти опыты излагаются не в историческом, а скорее в логическом порядке. Исторический порядок изложения включал бы много несущественных моментов, которые могли бы завуалировать внутреннее единство, присущее квантовой теории. В книге изложение экспериментальных фактов и теории ведется таким образом, чтобы подчеркнуть это единство

и показать, что каждый новый этап развития квантовой теории или непосредственно вытекает из опыта, или же логически следует из предыдущих этапов теории. Такое изложение помогает показать, что квантовая теория вовсе не чужда привычным представлениям и не похожа на собрание неких произвольных предположений, подтверждаемых лишь тем обстоятельством, что результаты ее малопонятных математических вычислений случайно совпали с опытом.

Для того чтобы изложение теории не было слишком абстрактным для начинающих читателей, в книге дается полное описание связей между квантовой теорией и предшествовавшей ей классической теорией. Где только это возможно, содержание квантовой теории иллюстрируется с помощью простых физических понятий. Кроме того, в последней главе части I указывается обширная область повседневных опытов, на примере трактовки которых можно постепенно убедиться в большей правильности квантотеоретических представлений по сравнению с классическими. В этой главе также детально обсуждаются некоторые философские следствия квантовой теории, и показано, что они приводят к значительным изменениям нашего общего взгляда на вселенную по сравнению с тем, который вырабатался классической теорией.

Читатель заметит, что в книге имеется много задач, которые следует считать частью текста, так как получаемые в них результаты часто используются при изложении основных представлений теории. Обычно можно понять эти результаты и без подробного решения задач, но мы рекомендуем читателю прорешать их. Основное назначение задач сводится к тому, чтобы заставить читателя конкретнее мыслить о только что обсуждавшемся предмете и тем облегчить ему понимание.

Работы [1—14] списка литературы непосредственно относятся к различным частям этой книги и могут быть полезны читателю.

ГЛАВА I

ВОЗНИКНОВЕНИЕ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

Закон Рэлея — Джинса

1. Равновесное излучение абсолютно черного тела. Исторически квантовая теория возникла при попытке расчета равновесного распределения электромагнитного излучения полости. Поэтому мы начнем с краткого описания основных свойств этого излучения. Энергия излучения возникает в стенках полости, непрерывно испускающих волны всевозможных частот и направлений, интенсивность которых очень быстро возрастает с повышением температуры. Однако

количество энергии излучения в полости не возрастает со временем безгранично, так как процесс испускания компенсируется процессом поглощения, который идет со скоростью, пропорциональной интенсивности излучения, уже существующего в полости. В состоянии термодинамического равновесия количество энергии $U(\nu)d\nu$, заключенное в интервале частот между ν и $\nu + d\nu$, определяется равенством интенсивностей испускания и поглощения энергии этой частоты стенками полости. И экспериментально, и теоретически [11] было показано, что после достижения равновесия энергия $U(\nu)$ зависит только от температуры стенок и не зависит ни от природы вещества, из которого сделаны стенки, ни от их конструкции [71*].

В стенке полости сделаем отверстие для наблюдения излучения. Если это отверстие очень мало по сравнению с размерами полости, то оно приведет к ничтожному изменению в распределении энергии излучения внутри полости. Тогда легко показать, что интенсивность выходящего из отверстия излучения, приходящегося на единицу телесного угла, равна $I(\nu) = \frac{c}{4\pi} U(\nu)$, где c — скорость света *).

Измерениями было обнаружено, что при определенной температуре функция $U(\nu)$ соответствует кривой, изображенной на рис. 1 непрерывной линией. При низких частотах энергия пропорциональна ν^2 , а при высоких она падает экспоненциально с ростом частоты. С увеличением температуры максимум этой кривой смещается в сторону больших частот; этим объясняется изменение цвета излучения, когда источник его нагревается.

На основе термодинамических соображений [11] Вин показал, что функция распределения энергии по частотам должна иметь следующий вид: $U(\nu) = \nu^3 f(\nu/T)$. Однако вид функции f уже нельзя определить только из одних термодинамических соображений. Вин получил довольно хорошее, хотя и неидеальное согласие с эмпирической кривой при помощи формулы

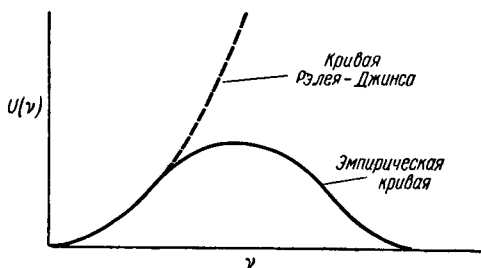


Рис. 1.

$$U(\nu) d\nu \sim \nu^3 e^{-h\nu/kT} d\nu \quad (\text{закон Вина}). \quad (1.1)$$

) Вывод этой формулы, а также более полные сведения об излучении абсолютно черного тела в [11, 71]. Термин «абсолютно черное тело» возник потому, что излучение, выходящее из отверстия в такой полости, идентично излучению идеально черного тела.

Здесь κ — постоянная Больцмана, а h — экспериментально определяемая постоянная (позже будет показано, что это известный квант действия *)).

С другой стороны, классическая электродинамика приводила к вполне определенному, но совершенно неправильному выражению для функции $U(\nu)$. Эта теоретическая формула, которая будет выведена ниже, имеет вид

$$U(\nu) d\nu \sim \kappa T \nu^2 d\nu \quad (\text{закон Рэлея — Джинса}). \quad (1.2)$$

Из рис. 1 видно, что закон Рэлея—Джинса совпадает с опытом при низких частотах, но предсказывает слишком большую интенсивность излучения в области высоких частот. Действительно, если произвести интегрирование по всем частотам, чтобы найти полную энергию, то мы приходим к расходящемуся результату, т. е. к абсурдному выводу, что в полости заключена бесконечно большая энергия. Экспериментальная кривая начинает заметно отклоняться от закона Рэлея — Джинса, когда величина $h\nu$ становится порядка κT . Следовательно, нужно пытаться построить такую теорию, которая приводит к классическим результатам для области $h\nu < \kappa T$, но отличается от классической теории при более высоких частотах.

Однако, прежде чем переходить к обсуждению путей, по которым должна быть изменена классическая теория, полезно детально исследовать вывод закона Рэлея — Джинса. Это позволит нам не только более подробно ознакомиться с теми явлениями, при попытках объяснения которых потерпела неудачу классическая физика, но также и ввести некоторые классические физические представления, которые окажутся весьма полезными для понимания квантовой теории. Кроме того, использование метода разложения в ряд Фурье для решения этих классических задач будет являться некоторой подготовкой для его дальнейшего применения в задачах квантовой теории.

2. Электромагнитная энергия. Согласно классической электродинамике, пустое пространство**), содержащее электромагнитное излучение, обладает энергией. В действительности эта лучистая энергия ответственна за способность пустой полости поглощать тепло. Эту энергию легко выразить через напряженности электрического $\mathcal{E}(x, y, z, t)$ и магнитного $\mathcal{H}(x, y, z, t)$ полей, а именно (см. [11], гл. 2; [71*], т. I, гл. VI):

$$E = \frac{1}{8\pi} \int (\mathcal{E}^2 + \mathcal{H}^2) d\tau; \quad (1.3)$$

*) Вин фактически ввел не постоянную Планка h , а постоянную h/κ .

**) Здесь термин «пустое пространство» следует понимать как пространство, лишенное материи в форме вещества, построенного из атомов. — Прим. ред.

здесь $d\tau = dx dy dz$ — элемент объема, а интегрирование проводится по всему пространству, занятому электрическим и магнитным полями.

Наша задача заключается в определении характера распределения этой энергии по различным частотам, существующим в полости при данной температуре стенок. Прежде всего воспользуемся методом разложения в ряд Фурье для электромагнитных полей и выразим энергию в виде суммы составляющих для каждой частоты. Поступив так, мы увидим, что поле излучения во всех отношениях ведет себя как собрание простых гармонических осцилляторов, так называемых «осцилляторов излучения». К этим осцилляторам можно применить статистическую механику и определить среднюю энергию каждого осциллятора, когда он находится в равновесии со стенками полости при температуре T . В итоге мы определим число осцилляторов, находящихся в данной области частот, и, умножая это число на среднюю энергию одного осциллятора, получим равновесную энергию, соответствующую этой частоте, т. е. закон Рэлея — Джинса.

3. Электромагнитные потенциалы. Начнем с краткого обзора электродинамики. Дифференциальные уравнения в частных производных электромагнитного поля, согласно Максвеллу, имеют вид

$$\text{rot } \mathfrak{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial t}, \quad (1.4)$$

$$\text{div } \mathfrak{H} = 0, \quad (1.5)$$

$$\text{rot } \mathfrak{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathfrak{E}}{\partial t} + 4\pi \mathbf{j}, \quad (1.6)$$

$$\text{div } \mathfrak{E} = 4\pi \rho, \quad (1.7)$$

где $\mathbf{j}$ — плотность тока, а ρ — плотность электрического заряда. Из уравнений (1.4) и (1.5) следует, что в самом общем случае напряженности электрического и магнитного полей могут быть выражены через векторный и скалярный потенциалы $\mathbf{A}$ и φ следующими формулами:

$$\mathfrak{H} = \text{rot } \mathbf{A} \quad (1.8)$$

и

$$\mathfrak{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \text{grad } \varphi. \quad (1.9)$$

Если $\mathfrak{E}$ и $\mathfrak{H}$ выражены таким образом, то уравнения (1.4) и (1.5) удовлетворяются тождественно, а уравнения для потенциалов $\mathbf{A}$ и φ получаются подстановкой соотношений (1.8) и (1.9) в уравнения (1.6) и (1.7).

Уравнения (1.8) и (1.9) не определяют однозначно потенциалов через поля. Если, например, добавить произвольный вектор — $\text{grad } \psi$ к векторному потенциалу, то магнитное поле не изменится, потому что имеет место тождество $\text{rot grad } \psi \equiv 0$. Если одновременно добавить

величину $\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi$ к скалярному потенциалу, то электрическое поле тоже остается неизменным. Итак, мы нашли, что электрические и магнитные поля остаются инвариантными к следующим преобразованиям потенциалов *):

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{A}' &= \mathbf{A} - \text{grad } \psi, \\ \varphi' &= \varphi + \frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t}. \end{aligned} \right\} \quad (1.10)$$

Формулы (1.10) носят название «калибровочного, или градиентного, преобразования».

Можно воспользоваться инвариантностью полей относительно этих градиентных преобразований для упрощения выражений напряженностей $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$. Обычно потенциалы выбирают так, чтобы удовлетворялось равенство $\text{div } \mathbf{A} = 0$. Покажем, что такой выбор всегда возможен. Предположим, что мы имеем дело с произвольными потенциалами $\mathbf{A}(x, y, z, t)$ и $\varphi(x, y, z, t)$. При помощи калибровочных преобразований (1.10) получим новые выражения для потенциалов $\mathbf{A}'$ и φ' . Для удовлетворения условия $\text{div } \mathbf{A}' = 0$ надо выбрать функцию ψ так, чтобы выполнялось равенство

$$\text{div } \mathbf{A} - \nabla^2 \psi = 0 \quad **).$$

Но это условие есть не что иное, как уравнение Пуассона, определяющее искомую величину ψ через известную функцию $\text{div } \mathbf{A}$. Решение этого уравнения всегда можно найти, и оно равно

$$\psi = - \frac{1}{4\pi} \int \int \int \frac{\text{div } \mathbf{A}(x', y', z', t) dx' dy' dz'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

Таким образом, мы доказали, что всегда возможно подобрать такое калибровочное преобразование, которое позволяет удовлетворить условию $\text{div } \mathbf{A}' = 0$.

Покажем теперь, что в *пустом пространстве* выбор условия $\text{div } \mathbf{A} = 0$ одновременно приводит к равенству $\varphi = 0$, что сильно упрощает запись уравнений электрического поля. Чтобы показать это, подставим уравнение (1.9) в (1.7), положив $\rho = 0$, так как, согласно условию, в пустом пространстве заряды отсутствуют. В результате получаем

$$\text{div } \mathcal{E} = - \frac{1}{c} \text{div } \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla^2 \varphi = 0.$$

*) $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$ являются основными физическими величинами, связанными с электромагнитным полем.

**) Здесь и далее ∇^2 (иначе $\nabla \nabla$, Δ) — оператор Лапласа, его применение к скаляру $\nabla^2 \psi = \text{div grad } \psi$, в декартовых координатах $\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}$. — Прим. ред.

Но так как $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$, то отсюда следует

$$\nabla^2 \varphi = 0.$$

Мы получили уравнение Лапласа. Хорошо известно, что единственным решением этого уравнения, непрерывным во всем пространстве, является решение $\varphi = 0$. (Все другие решения предполагают существование заряда в некоторых точках пространства и потому делают неприменимым уравнение Лапласа в этих точках.) Однако следует заметить, что условие $\varphi = 0$ справедливо только в пустом пространстве, потому что в присутствии заряда уравнение (1.7) приводит к уравнению Пуассона $\nabla^2 \varphi = -4\pi\rho$. Это уравнение имеет ненулевые непрерывные решения при условии, что величина ρ не тождественно равна нулю.

Итак, в пустом пространстве получаем следующие выражения для полей:

$$\mathcal{H} = \operatorname{rot} \mathbf{A}, \quad (1.11)$$

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (1.12)$$

кроме того, на эти поля наложено условие

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0. \quad (1.13)$$

Наконец, для того, чтобы получить дифференциальное уравнение в частных производных, определяющее векторный потенциал $\mathbf{A}$ в пустом пространстве, нужно подставить выражения (1.11) — (1.13) в уравнение (1.6), положив там $\mathbf{j} = 0$, ибо в отсутствии вещества нет и токов проводимости. В итоге получаем

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0 *). \quad (1.14)$$

Уравнения (1.11) — (1.14), вместе с граничными условиями, полностью определяют электромагнитные поля в полости, не содержащей ни зарядов, ни токов.

4. Граничные условия. Как указывалось в п. 1, экспериментально и теоретически **) было показано, что равновесное спектральное распределение плотности энергии в полости не зависит ни от ее формы, ни от вещества ее стенок. Следовательно, мы свободны в выборе простейших возможных граничных условий, отвечающих равновесному состоянию излучения. Выберем граничные условия, которые покажутся несколько искусственными с экспериментальной

*) Здесь $\nabla^2 \mathbf{A}$ — оператор Лапласа, примененный к вектору, $\nabla^2 \mathbf{A} = \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{A} - \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{A}$. — *Прим. ред.*

**) Теоретическое доказательство требует применения статистической механики. См., например, [15, 72*, 89*].

точки зрения, на которые сильно упрощают математическую трактовку.

Представим себе полость в виде куба с ребром L и очень тонкими стенками, сделанными из материала, который не является электрическим проводником. Далее, представим себе, что такая структура периодически повторяется в пространстве во всех направлениях, так что пространство заполнено кубами с ребром L . Положим также, что в соответствующих точках каждого куба поля одинаковые.

Мы утверждаем, что эти граничные условия удовлетворяют той же равновесной плотности излучения, как и любые другие граничные условия на стенках *). Чтобы доказать это, требуется лишь выяснить, почему условия равновесия не зависят от типа границы. С термодинамической точки зрения ответ заключается в том, что стенка просто предохраняет систему от прироста или потери энергии. Предположение о периодичности полей должно привести к тому же эффекту, потому что каждый куб не может ни получить энергию от других кубов, ни отдать им часть своей энергии; в противном случае система перестала бы быть периодической. Следовательно, основным требованием граничных условий является сохранение постоянного значения энергии в каждом отдельном кубе. Хотя этот выбор граничных условий несколько искусствен, но он должен дать правильный результат и облегчить нам вычисления, позволяя упростить разложение полей в ряд Фурье.

5. Разложение полей в ряд Фурье. Функция $A(x, y, z, t)$ может быть, таким образом, любым подходящим решением уравнений Максвелла с единственным ограничением, налагаемым нашими граничными условиями, чтобы она была периодической в пространстве с периодом L/n , где n — целое число **). Существует хорошо известная математическая теорема, согласно которой произвольная периодическая функция $f(x, y, z, t)$ ***)) может быть представлена при помощи ряда Фурье следующим образом:

$$f(x, y, z, t) = \sum_{l, m, n} \left[a_{lmn}(t) \cos \frac{2\pi}{L} (lx + my + nz) + b_{lmn}(t) \sin \frac{2\pi}{L} (lx + my + nz) \right], \quad (1.15)$$

*) При таких условиях фактически не требуется никаких стенок, но термодинамические результаты будут такие же, как и при произвольных стенках, в том числе, например, и для идеального отражателя или идеального поглотителя.

**) Кроме того, конечно, должны удовлетворяться обычные условия непрерывности, согласно которым функция A не может неограниченно возрастать или быть разрывной.

***)) Функция должна быть кусочно-непрерывной.

где l, m, n — целые числа, пробегающие значения от $-\infty$ до $+\infty$, включая нуль. Любой выбор коэффициентов a и b приводит к сходящемуся ряду, определяющему функцию $f(x, y, z, t)$, которая периодична в том смысле, что она принимает то же самое значение каждый раз, когда x, y или z меняются на L . Можно показать, что для заданной функции $f(x, y, z, t)$ коэффициенты $a_{lmn}(t)$ и $b_{lmn}(t)$ вычисляются по следующим формулам:

$$\left. \begin{aligned} a_{lmn}(t) + a_{-l, -m, -n}(t) &= \\ &= \frac{2}{L^3} \int_0^L \int_0^L \int_0^L \cos \frac{2\pi}{L} (lx + my + nz) f(x, y, z, t) dx dy dz, \\ b_{lmn}(t) - b_{-l, -m, -n}(t) &= \\ &= \frac{2}{L^3} \int_0^L \int_0^L \int_0^L \sin \frac{2\pi}{L} (lx + my + nz) f(x, y, z, t) dx dy dz. \end{aligned} \right\} \quad (1.16)$$

Эти формулы показывают, что функция f определяет только сумму коэффициентов a и разность коэффициентов b .

Из сказанного выше можно заключить, что функция f полностью определяется величинами $a_{lmn} + a_{-l, -m, -n}$ и $b_{lmn} - b_{-l, -m, -n}$, но мы предпочитаем сохранить ее определение через отдельные коэффициенты a_{lmn} и b_{lmn} , так как это приводит к более простым математическим выражениям.

Уравнения (1.16) выводятся с помощью следующих условий ортогональности *):

$$\left. \begin{aligned} \int_0^L \int_0^L \int_0^L \cos \frac{2\pi}{L} (lx + my + nz) \sin \frac{2\pi}{L} (l'x + m'y + n'z) dx dy dz &= 0, \\ \int_0^L \int_0^L \int_0^L \cos \frac{2\pi}{L} (lx + my + nz) \cos \frac{2\pi}{L} (l'x + m'y + n'z) dx dy dz &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (1.17a)$$

исключая случай $\begin{pmatrix} l = l' \\ m = m' \\ n = n' \end{pmatrix}$ или $\begin{pmatrix} l = -l' \\ m = -m' \\ n = -n' \end{pmatrix}$, в этом случае интегралы в (1.17a) равны $L^3/2$, исключая случай $l = m = n = 0$, когда

*) О происхождении термина «ортогональность» см. гл. 16, п. 10 и гл. 10, п. 24.

они равны L^3 :

$$\int_0^L \int_0^L \int_0^L \sin \frac{2\pi}{L} (lx + my + nz) \sin \frac{2\pi}{L} (l'x + m'y + n'z) dx dy dz = 0, \quad (1.176)$$

исключая случай $\begin{pmatrix} l = l' \\ m = m' \\ n = n' \end{pmatrix}$ или $\begin{pmatrix} l = -l' \\ m = -m' \\ n = -n' \end{pmatrix}$, в этом случае интеграл в (1.176) равен $L^3/2$. [Читателю в виде упражнения предлагается доказать равенства (1.17а) и (1.17б) и использовать полученные результаты для вывода формулы (1.16).]

Разложение в ряд Фурье в рассмотренной выше форме дает возможность представить произвольную функцию как сумму плоских стоячих волн всех возможных длин волн и амплитуд. Эта задача по существу такая же, как и при расчете колебаний струны или органической трубки, только здесь она не одномерная, а трехмерная.

Разложим теперь в ряд Фурье векторный потенциал. Так как **A**-вектор включает в себя три составляющих, то каждый из коэффициентов a_{lmn} и b_{lmn} также имеет три компоненты и, следовательно, должен быть представлен в виде вектора

$$\mathbf{A} = \sum_{l, m, n} \left[\mathbf{a}_{lmn}(t) \cos \frac{2\pi}{L} (lx + my + nz) + \mathbf{b}_{lmn}(t) \sin \frac{2\pi}{L} (lx + my + nz) \right].$$

Мы полагаем, что в написанных выше рядах коэффициент $\mathbf{a}_{000}$ равен нулю *).

Вводим теперь волновой вектор **k**, определяемый формулами

$$k_x = \frac{2\pi l}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi m}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi n}{L}, \quad k^2 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (l^2 + m^2 + n^2). \quad (1.18)$$

Выбирая оси координат таким образом, чтобы ось z была направлена вдоль вектора **k**, получаем $l = m = 0$ и $k = 2\pi n/L$. Из определения вектора **k** следует, что величина $k/2\pi$ равна числу волн, укладывающихся на длине L ; следовательно, длина волны равна $\lambda = 2\pi/k$ или

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (1.19)$$

*) Это следует из того, что та часть **A**, которая постоянна в пространстве, соответствует отсутствию магнитного поля и пространственно однородному электрическому полю $\left(\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right)$. Такое поле требует какого-то распределения электрического заряда для своего создания, например на границах, а так как мы предполагали выше, что таких зарядов не существует, то поэтому и надо положить, что $\mathbf{a}_{000} = 0$.

В выбранной системе координат волна представляется в виде $\cos\left(\frac{2\pi n z}{L}\right)$. Следовательно, вектор $\mathbf{k}$ ориентирован вдоль направления изменения фазы волны. Переходя опять к произвольным координатным осям, можно сказать, что вектор $\mathbf{k}$ совпадает с направлением распространения волны. Величина его равна $2\pi/\lambda$, причем возможно пользоваться только теми его значениями по уравнению (1.18), которым соответствуют целые числа l , m и n .

При таком упрощении обозначений получаем

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}} [\mathbf{a}_{\mathbf{k}}(t) \cos \mathbf{k}\mathbf{r} + \mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t) \sin \mathbf{k}\mathbf{r}], \quad (1.20)$$

где суммирование распространяется по всем допустимым значениям $\mathbf{k}$.

6. Поляризация волн. Применим теперь условие $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$ к уравнению (1.20). Это дает

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}} (-\mathbf{k}\mathbf{a}_{\mathbf{k}} \sin \mathbf{k}\mathbf{r} + \mathbf{k}\mathbf{b}_{\mathbf{k}} \cos \mathbf{k}\mathbf{r}) = 0.$$

Существует хорошо известная теорема, что если ряд Фурье тождественно равен нулю, то все коэффициенты $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ и $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}$ этого ряда должны также равняться нулю.

Задача 1. Доказать приведенную выше теорему, используя условие ортогональности (1.17).

Из сказанного выше следует, что должны выполняться равенства $\mathbf{k}\mathbf{a}_{\mathbf{k}}(t) = \mathbf{k}\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t) = 0$. Таким образом, векторы $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}(t)$ и $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t)$ оказываются перпендикулярны к вектору $\mathbf{k}$, так же как и векторы напряженности электрического и магнитного полей k -й волны. Таким образом, колебания нормальны к направлению распространения: волны являются поперечными. Направление электрического поля принято также называть *направлением поляризации*.

Чтобы определить направление векторов $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$, вернемся к системе координат, в которой ось z совпадает с вектором $\mathbf{k}$. Вектор $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ может иметь только компоненты вдоль осей x и y , и если мы определим их величины, то определим и величину, и направление вектора $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$.

Обозначим направление вектора $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ значком μ , записывая этот вектор с двумя индексами $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}$, где μ принимает значения 1 и 2. При $\mu = 1$ вектор $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}$ направлен вдоль оси x , а при $\mu = 2$ вдоль оси y . Тогда все возможные векторы $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ можно представить в виде суммы некоторых векторов $\mathbf{a}_{\mathbf{k}1}$ и $\mathbf{a}_{\mathbf{k}2}$. Следовательно, в наиболее общем виде векторный потенциал, удовлетворяющий условию $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$, может быть представлен формулой

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}, \mu} [\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}(t) \cos \mathbf{k}\mathbf{r} + \mathbf{b}_{\mathbf{k}\mu}(t) \sin \mathbf{k}\mathbf{r}]. \quad (1.21)$$

Здесь суммирование распространяется по всем возможным значениям векторов $\mathbf{k}$ и по двум возможным значениям индекса μ .

Используя формулы (1.14) и (1.21), можно проверить, что векторы $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}$ удовлетворяют следующему дифференциальному уравнению:

$$\frac{d^2 \mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}}{dt^2} + k^2 c^2 \mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu} = 0. \quad (1.22)$$

Это показывает, что $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}$ определяет собой осциллятор с простым гармоническим движением и с угловой частотой $\omega = kc$.

7. Вычисление электромагнитной энергии. При вычислении электромагнитной энергии прежде всего нужно выразить векторы $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ через коэффициенты Фурье векторного потенциала $\mathbf{A}$. Эти выражения имеют вид

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \sum_{\mathbf{k}, \mu} (\dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\mu} \cos \mathbf{k}\mathbf{r} + \dot{\mathbf{b}}_{\mathbf{k}\mu} \sin \mathbf{k}\mathbf{r}), \\ \mathbf{H} &= \sum_{\mathbf{k}, \mu} ([-\mathbf{k}\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}] \sin \mathbf{k}\mathbf{r} + [\mathbf{k}\mathbf{b}_{\mathbf{k}\mu}] \cos \mathbf{k}\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Задача 2. Вывести написанные выше выражения для $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$.

Вычислим теперь следующий интеграл по объему куба с ребром L от $\mathbf{E}^2/8\pi$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{8\pi} \int \mathbf{E}^2 d\tau &= \frac{1}{8\pi c^2} \sum_{\mathbf{k}, \mu} \sum_{\mathbf{k}', \mu'} \int_0^L \int_0^L \int_0^L (\dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\mu} \dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}'\mu'} \cos \mathbf{k}\mathbf{r} \cos \mathbf{k}'\mathbf{r} + \\ &+ \dot{\mathbf{b}}_{\mathbf{k}\mu} \dot{\mathbf{b}}_{\mathbf{k}'\mu'} \sin \mathbf{k}\mathbf{r} \sin \mathbf{k}'\mathbf{r} + \dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\mu} \dot{\mathbf{b}}_{\mathbf{k}'\mu'} \cos \mathbf{k}\mathbf{r} \sin \mathbf{k}'\mathbf{r} + \\ &+ \dot{\mathbf{b}}_{\mathbf{k}\mu} \dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}'\mu'} \sin \mathbf{k}\mathbf{r} \cos \mathbf{k}'\mathbf{r}) dx dy dz. \end{aligned}$$

С помощью уравнений (1.17) мы видим, что в правой части равны нулю все интегралы, за исключением членов с $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$; кроме того, равны нулю все члены, содержащие произведения $\dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\mu} \dot{\mathbf{b}}_{\mathbf{k}\mu'}$. Далее, $\dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\mu} \dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\mu'} = 0$, если $\mu \neq \mu'$, так как в этом случае, по определению, векторы ортогональны друг другу. В итоге написанное выше выражение примет вид

$$\int \frac{\mathbf{E}^2 d\tau}{8\pi} = \frac{L^3}{8\pi c^2} \sum_{\mathbf{k}, \mu} \left[\frac{1}{2} (\dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\mu})^2 + \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{b}}_{\mathbf{k}\mu})^2 \right].$$

Аналогичным образом, произведя лишь несколько больше алгебраических вычислений, находим

$$\int \frac{\mathbf{H}^2 d\tau}{8\pi} = \frac{L^3}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}, \mu} k^2 \left[\frac{1}{2} (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu})^2 + \frac{1}{2} (\mathbf{b}_{\mathbf{k}\mu})^2 \right].$$

Задача 3. Вывести выражение для $\int \mathbf{H}^2 d\tau$.

Таким образом, электромагнитная энергия полости (объема $L^3 = V$) равна

$$E = \frac{V}{8\pi c^2} \sum_{\mathbf{k}, \mu} \left\{ \frac{1}{2} [(\dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\mu})^2 + c^2 k^2 (\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu})^2] + \frac{1}{2} [(\dot{\mathbf{b}}_{\mathbf{k}\mu})^2 + c^2 k^2 (\mathbf{b}_{\mathbf{k}\mu})^2] \right\}. \quad (1.23)$$

8. Анализ полученного выражения электромагнитной энергии.

Исследуем наиболее важные свойства уравнения (1.23):

1) Энергия является суммой отдельных членов двух типов, один из которых содержит коэффициент $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}$, другой — $\mathbf{b}_{\mathbf{k}\mu}$. Это означает, что волны различной длины и поляризации не взаимодействуют друг с другом, поскольку взаимодействие любых двух систем всегда приводит к тому, что энергия одной из систем зависит от состояния другой. Здесь же мы видим, что энергия каждой волны с вектором распространения $\mathbf{k}$ и поляризацией μ пропорциональна только квадратам коэффициентов $\dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\mu}$ и $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}$ и не зависит ни от каких других коэффициентов a или b . Подобный результат имеет место и для всех членов с коэффициентами b .

2) Энергия, связанная с каждым из коэффициентов $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}$ (или $\mathbf{b}_{\mathbf{k}\mu}$), математически выражается так же, как и энергия гармонического осциллятора. Гармонический осциллятор с массой m и угловой частотой ω обладает энергией

$$E = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \omega^2 x^2).$$

По аналогии можно написать

$$m = \frac{V}{8\pi c^2}, \quad \omega = kc.$$

Тогда линейная частота ν равна $\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{kc}{2\pi} = \frac{c}{\lambda}$. Мы знаем, конечно, что электромагнитная волна с длиной волны λ обладает как раз такой частотой (см. также уравнение (1.22)). Это показывает, что используемая аналогия с гармоническим осциллятором дает правильное описание характера изменения коэффициента a .

Аналогию с осциллятором можно продолжить и дальше. Например, в случае осциллятора вводится импульс $p = m\dot{x}$. В нашем случае импульс равен

$$\mathbf{p}_{\mathbf{k}\mu} = \frac{V}{8\pi c^2} \dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\mu}.$$

Затем можно ввести гамильтониан осциллятора

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

Для коэффициента $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}$ получаем соответственно

$$H = \frac{8\pi c^2}{L^3} \frac{(\mathbf{p}_{\mathbf{k}\mu})^2}{2} + \frac{L^3}{8\pi} k^2 \frac{(\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu})^2}{2}. \quad (1.24)$$

Аналогичное выражение можно получить и для коэффициента $\mathbf{b}_{\mathbf{k}\mu}$.

Точные уравнения движения можно получить из уравнений Гамильтона

$$\dot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\mu} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_{\mathbf{k}\mu}} \quad \text{и} \quad \dot{\mathbf{p}}_{\mathbf{k}\mu} = - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}},$$

которые приводят к уравнениям (1.22), полученным ранее непосредственно из уравнений Максвелла,

$$\ddot{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\mu} + c^2 k^2 \mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu} = 0, \quad (1.25)$$

и аналогично для коэффициента $\mathbf{b}$.

Как мы видели, коэффициенты $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}$ и $\mathbf{b}_{\mathbf{k}\mu}$ аналогичны координатам отдельных невзаимодействующих гармонических осцилляторов. В известном смысле величины $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}$ и $\mathbf{b}_{\mathbf{k}\mu}$ можно также рассматривать и как координаты поля излучения. Это можно сделать потому, что если эти величины заданы, то поле определяется повсюду при помощи уравнения (1.20). Таких координат существует бесконечное множество, так как существует бесконечное множество допустимых значений $\mathbf{k}$. Но это — дискретная или счетная бесконечность, в отличие от бесконечности континуума точек на линии. Основное преимущество от использования разложения Фурье заключается в том, что это дает нам возможность описать поля в пространстве континуума при помощи бесконечного дискретного множества координат.

Возникает вопрос о числе независимых координат, соответствующих каждому допустимому значению $\mathbf{k}$. Во-первых, каждому $\mathbf{k}$ отвечают два направления поляризации; во-вторых, для каждого $\mathbf{k}$ и μ мы имеем свои коэффициенты $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu}$ и $\mathbf{b}_{\mathbf{k}\mu}$. Таким образом, на первый взгляд может показаться, что для каждого значения $\mathbf{k}$ требуются четыре независимых координаты. Но из уравнения (1.16) видно, что требуется определить лишь комбинации коэффициентов $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\mu} + \mathbf{a}_{-\mathbf{k}\mu}$ и $\mathbf{b}_{\mathbf{k}\mu} - \mathbf{b}_{-\mathbf{k}\mu}$, так что число необходимых независимых переменных может быть уменьшено вдвое. Это означает, что для каждого $\mathbf{k}$ существует две независимые координаты.

9. Число осцилляторов. Теперь нам надо найти число осцилляторов с частотами, лежащими в интервале от ν до $\nu + d\nu$. Так как $\nu = kc/2\pi$, то задача эквивалентна определению числа осцилляторов в интервале от k до $k + dk$.

Для любого разумного значения k число волн, находящихся в полости, обычно очень велико. Например, при средних температурах большая часть излучения находится в инфракрасной области с дли-

нами волн $\sim 10^{-4}$ см. Поэтому, когда k изменяется таким образом, что в полости укладывается на одну длину волны больше, то в результате происходит лишь ничтожное изменение величины k . Это позволяет выбрать интервал dk столь малым, чтобы ни одна существенная физическая величина (как, например, средняя энергия) не изменялась заметно внутри этого интервала, и вместе с тем выбрать этот интервал все же достаточно большим, чтобы он включал очень много осцилляторов излучения. Это означает, что число осцилляторов можно считать условно непрерывным и ввести для него функцию плотности.

Найдем теперь число осцилляторов, заключенных в объеме $dk_x dk_y dk_z$. Если вообразить пространство координат l , m и n , то каждому набору целочисленных значений l , m и n будет соответствовать один осциллятор. Следовательно, в единичном кубике пространства l , m , n находится один осциллятор, и поэтому плотность осцилляторов в этом пространстве равна единице. Чтобы перейти к $\mathbf{k}$ -пространству, воспользуемся уравнением (1.18); это дает

$$\delta N_1 = dl dm dn = \frac{V}{(2\pi)^3} dk_x dk_y dk_z. \quad (1.26)$$

Для дальнейшего удобнее ввести полярные координаты в $\mathbf{k}$ -пространстве. Если написать $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$, то элемент объема запишется в виде $k^2 dk d\Omega$, где $d\Omega$ — элемент телесного угла. Так как мы не интересуемся направлением вектора $\mathbf{k}$, то проинтегрируем по $d\Omega$ и получим для элемента объема $4\pi k^2 dk$; тогда

$$\delta N_1 = \frac{4\pi V}{(2\pi)^3} k^2 dk. \quad (1.27)$$

Заменяя $v = kc/2\pi$, получаем

$$\delta N_1 = 4\pi V \frac{v^2 dv}{c^3}. \quad (1.28)$$

Это выражение дает число возможных значений $\mathbf{k}$ в интервале от v до $v + dv$. Как показано в п. 8, где обсуждался смысл коэффициентов $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$, существует две независимые координаты для каждого $\mathbf{k}$ в соответствии с двумя направлениями поляризации. Следовательно, для полного числа осцилляторов, находящихся в интервале от v до $v + dv$, получаем

$$\delta N = 2\delta N_1 = \frac{8\pi V}{c^3} v^2 dv. \quad (1.29)$$

10. Закон равномерного распределения энергии по степеням свободы. Для вычисления средней энергии каждого осциллятора, находящегося в термодинамическом равновесии со стенками полости, применим к этим осцилляторам классическую статистическую механику.

Хотя эта теория выводилась для одних только осцилляторов вещества, но при выводе пользуются лишь формальными свойствами уравнений движения. Поэтому любые другие системы, формально ведущие себя подобно осцилляторам вещества, должны обладать тем же самым равновесным распределением энергии. В классической статистической механике [15] показано, что в любом ансамбле независимых, невзаимодействующих систем (подобных ансамблю осцилляторов излучения) вероятность того, что координаты лежат в интервале от q до $q + dq$, а соответствующие импульсы между p и $p + dp$, равна [72*, 89*]

$$Ae^{-E/kT} dp dq,$$

здесь E — полная энергия, равная сумме кинетической и потенциальной энергий, A — нормировочный фактор, определяемый из требования, чтобы интеграл, дающий полную вероятность, равнялся единице, а именно

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Ae^{-E/kT} dp dq = 1.$$

Для идеального газа $E = p^2/2m$, и мы получаем известное распределение Максвелла — Больцмана для скоростей

$$Ae^{-p^2/2mkT} dp dq.$$

Для гармонического осциллятора имеем

$$E = \frac{p^2}{2m} + m\omega^2 \frac{q^2}{2}.$$

Удобно преобразовать эти уравнения, введя новые независимые переменные, определяемые выражениями

$$p = \sqrt{2m} P; \quad q = \frac{Q}{\omega} \sqrt{\frac{2}{m}}.$$

Это дает $E = P^2 + Q^2$ и

$$\frac{1}{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-E/kT} \frac{2}{\omega} dP dQ.$$

Вероятность того, что система находится в интервале между P и $P + dP$ и Q и $Q + dQ$, равна

$$dW(P, Q) = \frac{e^{-(P^2 + Q^2)/kT} dP dQ}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(P^2 + Q^2)/kT} dP dQ}.$$

Перейдем к полярным координатам R, φ в фазовом пространстве, где

$$P^2 + Q^2 = R^2 = E \quad \text{или} \quad R dR = \frac{dE}{2}.$$

Теперь элемент поверхности имеет вид

$$R dR d\varphi = \frac{1}{2} d(R^2) d\varphi = \frac{dE}{2} d\varphi.$$

Так как мы не интересуемся зависимостью от угла φ , то можем проинтегрировать по этой величине. Тогда для нормированной вероятности нахождения энергии между E и $E + dE$ получаем

$$W(E) dE = \frac{e^{-E/\kappa T} dE}{\int_0^\infty e^{-E/\kappa T} dE}.$$

Среднее значение энергии $\bar{E}$ находим интегрированием выражения $EW(E)$ по всем возможным значениям энергии. Это означает, что мы оцениваем каждое значение энергии ее вероятностью *). В итоге находим

$$\bar{E} = \frac{\int_0^\infty E e^{-E/\kappa T} dE}{\int_0^\infty e^{-E/\kappa T} dE} = \kappa T \frac{\int_0^\infty e^{-\varepsilon} \varepsilon d\varepsilon}{\int_0^\infty e^{-\varepsilon} d\varepsilon} = \kappa T, \quad (1.30)$$

где $\varepsilon = E/\kappa T$. Таким образом, мы показали, что средняя энергия каждого осциллятора равна κT . Этот вывод является частным случаем общей теоремы о равномерном распределении энергии по степеням свободы (см. [11], стр. 161; [71*], т. I, стр. 257).

Объединяя уравнения (1.29) и (1.30), получаем закон Релея—Джинса

$$U(\nu) d\nu = \bar{E} \delta N = \frac{8\pi V}{c^3} \kappa T \nu^2 d\nu. \quad (1.31)$$

Так как этот закон противоречит опытам, то мы заключаем, что представления классической физики в некотором отношении недостаточны для описания явлений взаимодействия вещества и излучения.

*) Вероятность $W(E)$ поэтому часто называют «статистическим весом». —
Прим. ред.

Гипотеза Планка

11. Квантование осцилляторов излучения. В поисках путей изменения описанного выше способа трактовки, которые дали бы возможность уменьшить долю энергии, излучаемой в области высоких частот, Планк вынужден был сделать следующее предположение: энергия осциллятора с собственной частотой ν может принимать только значения, кратные величине $h\nu$. Эта основная единица энергии ($h\nu$) неодинакова для всех осцилляторов, так как она пропорциональна частоте. Таким образом, энергия осциллятора равна $E = nh\nu$, где n — целое число, изменяющееся от 0 до ∞ . С помощью этого предположения Планк получил точное соответствие, в пределах экспериментальных ошибок, между теоретической формулой и наблюдаемым распределением энергии излучения по частотам.

Согласно классической механике, не должно существовать никаких ограничений, накладываемых на возможные значения энергии, которыми может обладать осциллятор. Опыты с такими осцилляторами, как радиоволны, часовые пружины и маятники, как будто бы подтверждают такое утверждение. Как же можно согласовать гипотезу Планка с этими хорошо известными результатами? Ответ заключается в том, что постоянная h оказывается очень малой величиной, равной приблизительно $6,6 \cdot 10^{-27}$ эрг · сек. Следовательно, даже для микроволн, обладающих частотой $\sim 10^{10}$ гц, основная единица энергии равна всего лишь $6,6 \times 10^{-17}$ эрг; ее можно обнаружить, только применяя наиболее чувствительную из существующих ныне измерительных аппаратур. Ясно, что в часовых пружинах и маятниках, с периодом порядка 1 сек, основная единица энергии настолько мала, что при относительно грубых наблюдениях, которые сейчас можно производить, возможные значения энергии кажутся нам непрерывными. Однако для световых волн частот порядка $\nu \sim 10^{15}$ гц энергия $h\nu$ оказывается порядка $\sim 10^{-12}$ эрг; эту величину уже можно обнаружить при помощи чувствительных приборов. Поэтому при переходе в область более высоких частот, где основная единица энергии возрастает, становится легче наблюдать квантование уровней энергии.

Чтобы получить формулу Планка для распределения энергии, необходимо определить вероятность того, что осциллятор обладает n -м возможным значением энергии. Если n столь велико, что дискретный характер энергии становится несущественным (например, в случае радиоволн), то мы должны получить результат, совпадающий с классической механикой, которая, как известно, справедлива в этой области длин волн. Для получения такого согласия проще всего выбрать вероятность в виде той же функции энергии, как и в клас-

сической теории*), а именно в виде $e^{-E/\chi T}$. Тогда для заданной энергии $E_n = nh\nu$ вероятность равна

$$W(n) \sim e^{-E_n/\chi T} = e^{-nh\nu/\chi T}.$$

Нормируя это выражение, находим**)

$$W(n) = \frac{e^{-nh\nu/\chi T}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu/\chi T}} = e^{-nh\nu/\chi T} (1 - e^{-h\nu/\chi T}).$$

Средняя энергия равна

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \sum_{n=0}^{\infty} E_n W(n) = (1 - e^{-h\nu/\chi T}) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu/\chi T} nh\nu = \\ &= h\nu (1 - e^{-h\nu/\chi T}) \sum_{n=0}^{\infty} ne^{-nh\nu/\chi T}. \end{aligned}$$

Для вычисления этой суммы напишем

$$\sum_{n=0}^{\infty} ne^{-n\alpha} = -\frac{d}{d\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha} = -\frac{d}{d\alpha} \frac{1}{1 - e^{-\alpha}} = \frac{e^{-\alpha}}{(1 - e^{-\alpha})^2}.$$

Применяя этот результат, получим (при $\alpha = \frac{h\nu}{\chi T}$)

$$\bar{E} = \frac{h\nu e^{-h\nu/\chi T}}{1 - e^{-h\nu/\chi T}}. \quad (1.32a)$$

Умножая (1.32a) на δN , находим функцию распределения Планка

$$U(\nu) = \frac{8\pi V}{c^3} h\nu^3 \frac{e^{-h\nu/\chi T}}{1 - e^{-h\nu/\chi T}}. \quad (1.32b)$$

12. Обсуждение результатов. Для малых значений отношения $h\nu/\chi T$ экспоненциальные функции можно разложить в ряд по степеням этой величины и, оставляя только первые члены, получить $\bar{E} = \chi T$, т. е. классический результат, что согласуется со справедливостью закона Рэлея — Джинса при малых значениях $h\nu/\chi T$. Если $h\nu/\chi T$ велико, то $\bar{E} \rightarrow h\nu e^{-h\nu/\chi T}$. Это приводит к закону Вина. При промежуточных значениях $h\nu/\chi T$ наблюдается отличное согласие с опытом

) Такой выбор частично оправдывается успехом использования этой функции для расчета распределения энергии излучения абсолютно черного тела. Однако последовательное развитие квантовой статистики [15, 72] показало, что никакая другая функция вероятности распределения не привела бы к термодинамическому равновесию.

**) Здесь использовано разложение $\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$.

при всех температурах. Следовательно, несмотря на необычайность гипотезы Планка, ясно, что она весьма плодотворна.

Уменьшение средней энергии для осцилляторов высокой частоты связано с тем, что для их перевода в первое возбужденное состояние требуется большая энергия, и поэтому такие переходы осуществляются весьма редко. Если ν понижается или T возрастает, то становится более вероятным, что осциллятор получает квант энергии. Поведение осциллятора, возбужденного до высокого значения квантового числа n , будет по существу классическим, поскольку основная единица энергии $h\nu$ в этом случае значительно меньше, чем средняя энергия такого осциллятора $\propto T$.

13. Осцилляторы вещества и излучение. Первоначальная гипотеза Планка заключалась не в представлении о квантовании осцилляторов поля излучения, как это было только что изложено. Он предполагал, что излучение находится в равновесии с осцилляторами вещества стенок полости и что эти осцилляторы вещества могут излучать или поглощать энергию электромагнитного поля только квантами с энергией $E = nh\nu$. Исходя из такого предположения, он получал точно такую же формулу для распределения энергии излучения. Квантование осцилляторов излучения явилось более поздней идеей, которая, как будет показано ниже, приводит ко многим важным следствиям. Более того, квантование осцилляторов излучения почти целиком объясняет тот факт, что спектр абсолютно черного тела не зависит от вещества стенок.

Единственно возможной альтернативой является представление, что всякое вещество, а не только гармонические осцилляторы, может поглощать или испускать излучение только квантами величины $E = h\nu$. Но это означает, что любое излучение, когда-либо испущенное, обладает энергией, кратной величине $E = h\nu$. Даже если существуют какие-либо другие энергии, то по гипотезе Планка они не могут взаимодействовать с веществом и, следовательно, не могут быть обнаружены. Значит эта гипотеза эквивалентна утверждению, что все излучающие осцилляторы имеют допустимые энергии $E = nh\nu$.

14. Квантование осцилляторов вещества. Для того чтобы определить, применима ли квантовая гипотеза Планка к осцилляторам вещества, можно исследовать вопрос об удельной теплоемкости твердых тел. Например, в кристалле каждый атом в равновесном состоянии расположен в соответствующих узлах решетки; при возбуждении атомы могут колебаться вблизи положения равновесия, причем в случае малых колебаний это будет приближенно простое гармоническое движение.

В первом приближении можно считать, что осцилляторы независимы друг от друга. Частота колебания может быть вычислена через массу атома и упругие постоянные кристалла [11, 72*]. Согласно классической теореме о равномерном распределении энергии по сте-

пеням свободы, каждый осциллятор обладает энергией κT , и потому его доля в удельной теплоемкости равна величине κ на атом. Экспериментально же было найдено, что удельная теплоемкость стремится к нулю при абсолютном нуле и асимптотически возрастает к величине κ на атом при высоких температурах, как показано на рис. 2. Отсюда следует, что классическая теория действительно неверна при низких температурах.

Эйнштейн предположил, что экспериментально наблюдаемая кривая может быть объяснена, если предположить, что молекулярные осцилляторы квантуются с энергией $E = h\nu$. В противоположность осцилляторам излучения, которые могут обладать любыми частотами, осцилляторы вещества обладают только *одной* частотой, которая является характеристической частотой вещества. Используя результат Планка, т. е. уравнение (1.32), для случая заданной частоты, находим

$$\bar{E} = \frac{h\nu e^{-h\nu/\kappa T}}{1 - e^{-h\nu/\kappa T}} \quad \text{и} \quad \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{(h\nu)^2}{\kappa T^2} \frac{e^{-h\nu/\kappa T}}{(1 - e^{-h\nu/\kappa T})^2}.$$

Эта формула явно предсказывает, что удельная теплоемкость стремится к величине κ при высоких температурах и к нулю при очень низких температурах в соответствии с множителем

$$\frac{h^2 \nu^2}{\kappa T^2} e^{-h\nu/\kappa T}.$$

Формула в общем случае хорошо совпадает с экспериментом, за исключением очень низких температур ($\sim 10^\circ \text{K}$).

Причину расхождения при очень низких температурах объяснил Дебай (см. [11], стр. 450; [72*], гл. VIII). В действительности колебания каждого атома нельзя считать независимыми от колебаний других атомов, ибо атомы связаны между собой межмолекулярными силами. Поэтому расчет с использованием независимых колебаний не является вполне строгим.

Для описания связанных колебаний молекул можно рассмотреть, например, одномерную цепочку частиц. Предположим, что каждая частица взаимодействует только со своими двумя ближайшими соседями. Тогда можно показать ([16], стр. 121 и 125 или стр. 136 и 140 перевода), что волны распространяются по такой системе аналогично их распространению вдоль цепочки с тем исключением, что здесь существуют как продольные, так и поперечные волны, в то время как волны в цепочке только поперечные. Если длина волны велика по сравнению с расстоянием между частицами, то распространение

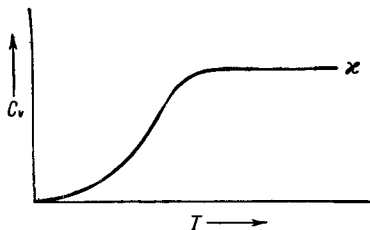


Рис. 2.

очень мало отличается от распространения в сплошной струне; но если длина волны становится соизмеримой со средним расстоянием между частицами, то закон распространения колебаний изменяется. Для длин волн меньших, чем среднее расстояние между частицами, распространение становится невозможным.

Задача 4. Пусть в одномерной цепочке из частиц, определенной выше, равновесное расстояние между частицами равно a . Предположим, что сила, действующая на n -ю частицу, равна

$$F_n = -m\omega_0^2 [(x_n - x_{n-1}) + (x_n - x_{n+1})] = m\ddot{x}_n,$$

где x_n — отклонение n -й частицы от положения равновесия.

Найти решения в виде $x_n = A_n e^{i\omega t}$ и показать, что можно выбрать A_n в виде $A_n = e^{in\alpha}$, где α — соответствующая постоянная, связь которой с ω получается из решения уравнений.

Показать, что колебания низких частот подобны звуковым волнам и что $\omega \cong 2\pi v/\lambda$, где $v = \omega_0 a$ — скорость звука в системе. Показать также, что существует максимальная частота.

Для трехмерного случая могут быть проведены аналогичные рассуждения, и таким же путем можно описать распространение звуковых волн в кристалле. Как и для электромагнитного поля, можно рассматривать амплитуды возможных звуковых волн в качестве координат, описывающих состояние системы. Так как со временем эти координаты гармонически колеблются, то энергии связанных с ними осцилляторов должны квантоваться (см. пп. 10 и 13). Однако при вычислении энергии мы должны учесть, что допустимо только конечное число длин волн, а также, что связь между частотой и длиной волн становится более сложной, если приближаться к длинам волн, сравнимым с межатомными расстояниями. Если все это принять во внимание, то квантовая гипотеза приводит к очень хорошему совпадению с экспериментальным ходом удельной теплоемкости при всех температурах. Таким образом, мы получим доказательство существования не только кванта электромагнитной энергии, но также и кванта звуковой энергии.

15. Основные выводы гл. 1. Можно сделать общий вывод, что энергия всех систем, совершающих гармонические колебания, квантуется порциями $E = nh\nu$ независимо от того, являются ли эти системы осцилляторами вещества, звуковыми или электромагнитными волнами. Так как мы предполагаем, что все системы могут взаимодействовать друг с другом, то квантование одного какого-либо типа гармонического осциллятора требует аналогичного квантования всех других типов. Если эксперименты не подтвердят существования такого единства, то от квантовой теории придется отказаться или по крайней мере переделать ее коренным образом.

ДАЛЬНЕЙШЕЕ РАЗВИТИЕ СТАРОЙ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

Новые понятия квантовой теории

До сих пор квантовые ограничения на допустимые значения энергий возникали только в связи с гармоническими осцилляторами. Однако мы увидим, что результаты многих экспериментов, а также последовательное и логическое развитие квантовых гипотез приводят к выводу, что все виды материи подвергаются квантовым ограничениям. Этот вывод позволяет правильно объяснить огромную совокупность экспериментальных фактов, для которых выводы классической теории или неправильны, или сомнительны. В качестве иллюстрации рассмотрим фотоэлектрический эффект, эффект Комптона, энергетические уровни атомных систем и законы испускания и поглощения электромагнитного излучения. Во всех этих случаях мы также детально исследуем характер приближения квантовых законов к классическому пределу.

1. Фотоэлектрический эффект. Начнем с рассмотрения явления фотоэлектрического эффекта. Одного лишь изучения излучения абсолютно черного тела было достаточно для косвенного выяснения того, что электромагнитные волны могут изменять свою энергию только на величины, кратные кванту $h\nu$. Однако желательно также получить и непосредственное доказательство правильности этого утверждения, изучая испускание и поглощение излучения. Раньше всего экспериментальные исследования этого вопроса были произведены при изучении фотоэлектрического эффекта. Эти опыты показали, что электроны испускаются поверхностью металла*), освещаемой видимым или ультрафиолетовым светом; было найдено также, что кинетическая энергия этих электронов не зависит от интенсивности излучения, а зависит лишь от частоты по следующему закону:

$$\frac{1}{2} m v^2 = h\nu - W. \quad (2.1)$$

*) Некоторые электроны освобождаются из слоев, лежащих под поверхностью; они теряют дополнительно энергию вследствие прохождения через толщу металла.

Здесь ν — частота падающего излучения, а W — работа выхода из металла или, другими словами, энергия, требуемая для удаления электрона из внутренних слоев металла.

Эйнштейн в 1905 г. первый связал этот результат с гипотезой Планка. Детальное изучение опытных данных показало, что h есть универсальная постоянная, равная величине h , входящей в теорию Планка. Такое совпадение является мощным подтверждением гипотезы, что поле излучения может изменять энергию лишь в единицах, кратных $h\nu$. Если бы эта постоянная не была получена, то теория встала бы перед большими трудностями*).

Следующей важной проверкой является попытка выяснить, почему электрон поглощает только квант энергии независимо от интенсивности излучения. В связи с этим стоит заметить, что при излучении очень малой интенсивности мы просто получаем соответственно малый ток эмиссии фотоэлектронов.

Самое простое объяснение этого явления сводится к следующему: свет состоит из частиц**), которые благодаря своей локализации могут при столкновении с фотоэлектроном передать ему всю свою энергию. Эта гипотеза подкрепляется опытами, в которых на фотопластинку направляются лучи очень низкой интенсивности [13, 71*], получают хаотически расположенные темные пятна со средней плотностью, пропорциональной интенсивности света. Для очень интенсивного пучка в пределе распределение пятен становится настолько плотным, что они практически непрерывны.

Когда пучок столь интенсивен, что кажется непрерывным, то он в некотором роде становится эквивалентен тому, что в классической физике называется *световой волной*. Такая «классическая» волна обладает определенной мощностью, равной энергии, падающей на поверхность единичной площади за единицу времени. Обозначим эту величину через S . Тогда если существует много квантов (интенсивный пучок или низкие частоты), то величина S должна равняться среднему числу N падающих квантов энергии $h\nu$ на единицу площади в секунду. Следовательно, имеем

$$S = Nh\nu.$$

Если существует лишь несколько квантов, то N будет вероятностью того, что квант падает на единицу площади в секунду.

) Важнейшие и первые работы по экспериментальному изучению квантовой природы фотоэффекта принадлежат А. Ф. Иоффе [73]. Первое прецизионное определение постоянной h по измерениям фотоэффекта было проведено П. И. Лукирским и С. Прилежаевым [74*]. — *Прим. ред.*

**) Под частицей мы подразумеваем материальное образование, которое всегда может быть локализовано внутри определенной минимальной области, которую называют ее *размером*.

Хотя предположение, что свет состоит из локализованных частиц, дает нам возможность очень просто объяснить фотоэлектрический эффект, но оно не согласуется с огромной совокупностью экспериментов, приводящих к выводу, что свет является формой *волнового движения*. В качестве примера того типа эксперимента, который требует волновой интерпретации света, рассмотрим измерения интенсивности дифракционных полос света, падающего на экран после прохождения через одну или несколько щелей. Очень часто имеет место такое явление, что при двух открытых щелях, близких друг к другу, интенсивность света в некоторых местах экрана будет очень мала, в то время как в тех же местах при пропускании света только через одну щель можно наблюдать высокую интенсивность. Эти результаты и количественно, и качественно объясняются предположением, что свет состоит из волн, которые интерферируя могут усиливаться или ослабляться; при этом волны, приходящие от каждой из двух щелей, при некоторых условиях могут гасить друг друга.

Однако невозможно объяснить интерференцию, если предположить, что свет состоит из локализованных частиц. Такие частицы должны были бы проходить или через одну, или через другую щель, и открытие второй щели едва ли могло бы препятствовать частице достигнуть определенной точки, в которую она свободно попадала при закрытой второй щели. С другой стороны, предположение о волновой природе света не только объясняет этот частный эксперимент, но также и огромную совокупность других опытов с излучением различных длин волн от радиоволн до рентгеновских лучей. Поэтому несомненно желательно, если это возможно, попытаться понять появление квантов с помощью волновой теории света.

Для этого рассмотрим фотоэлектрический эффект с классической точки зрения. Когда излучение сталкивается с электроном, колеблющимся внутри атома, то оно передает свою энергию электрону. Если электрическое поле колеблется с частотой, которая находится в резонансе с частотой электрона в атоме, то электрон будет поглощать энергию световой волны, пока он не освободится из атома. Надо постараться объяснить фотоэлектрический эффект, предположив, что свойства атома таковы, что электрон будет сохранять полученную от света энергию и находиться в атоме до тех пор, пока он не накопит ее до величины $h\nu$, после чего он покидает атом. Если бы атом обладал этими свойствами, то для света с очень маленькой интенсивностью фотоэлектрический эффект не должен был бы наблюдаться в течение очень долгого времени, так как должно пройти значительное время, чтобы накопить необходимый квант энергии. Соответствующие опыты проводились с металлическими пылинками и очень слабым светом. Эти пылинки были настолько малы, что потребовалось бы много часов для накопления энергии $h\nu$.

Однако немедленно после освещения их появлялось некоторое количество фотоэлектронов.

Объяснить этот результат можно было бы, предположив существование в металле электронов с любыми энергиями, когда же на металл падает световая волна, то из него немедленно может выбрасываться некоторое количество электронов с соответствующей энергией. Однако если рассмотреть случай $h\nu \gg W$, то кажется неправдоподобным, что электроны с таким большим избытком энергии неограниченно долго оставались внутри металла, пока их не освободит облучение световой волной с точно требуемой частотой. Кроме того, было найдено, что независимо от способа вырывания электрона из металла (например, при бомбардировке металла протонами или электронами) ему всегда нужно сообщить одну и ту же минимальную энергию, равную работе выхода W . Также было найдено, что нельзя вырвать электроны из атомов газа до тех пор, пока им не сообщена определенная минимальная энергия, равная потенциалу ионизации I (см. обсуждение опытов Франка — Герца в п. 15). Однако и в этом случае при воздействии очень слабого света некоторое число электронов мгновенно освобождается из атомов газа, и их кинетическая энергия равна разности $h\nu - I$. Таким образом, принимая во внимание все эти факты, приходится исключить возможность объяснения фотоэлектрического эффекта с помощью предположения, что некоторые электроны с самого начала обладают почти всей энергией, с которой они вырываются.

Если бы электроны в металле обладали энергиями в таких пределах, то было бы трудно сделать квантовую гипотезу последовательной, потому что в этом случае для освобождения электрона должна была бы поглощаться только часть кванта. Однако, согласно гипотезе Планка, осцилляторы излучения в каждом процессе поглощения могут отдавать как минимум лишь целый квант. Что произошло бы тогда с остатком кванта, если бы только часть его поглотилась электроном?

Эти конкретные попытки объяснить фотоэлектрический эффект при помощи процессов непрерывного накопления энергии потерпели полную неудачу. Такова же была судьба всех остальных подобных попыток, которые когда-либо предпринимались. Это означает, что волновая теория неспособна объяснить внезапную локализацию конечных порций энергии в одном электроне. В итоге мы попали в весьма затруднительное положение. Одна группа опытов указывает, что свет — это *частицы*, которые могут быть локализованы; другая же группа, не менее убедительных опытов, доказывает, что свет — это *волны*. Какое же из этих утверждений правильно? Наш ответ будет гласить, что ни одно из них не может быть правильным.

Прежде чем мы сумеем получить правильную теорию двойственной корпускулярно-волновой природы свойств света, мы убедимся, что

необходимо произвести радикальные изменения в некоторых наших наиболее фундаментальных представлениях о свойствах материи и энергии. Эти новые представления будут раскрываться во всей этой книге, но главным образом в гл. 6, 8 и 22. Здесь же мы предварительно будем просто утверждать, что свет существует в форме *фундаментальных образований* или *квантов*, которые при известных условиях действуют подобно частицам, а при других — подобно волнам. Положение сильно напоминает басню о семи слепых, которые наткнулись на слона. Один из них ощупал хобот и сказал: «слон — это канат», другой ощупал ногу и сказал: «слон — это, очевидно, дерево» и т. д. Вопрос, на который мы должны ответить, заключается в следующем: можем ли мы найти единое представление, объединяющее все наши различные сведения о природе света, так же как наше понятие о слоне объединяет ощущения семи слепых?

2. Различия между классическими и квантовыми законами физики. Первый шаг в нашей программе введения новых представлений, необходимых для квантовой теории, заключается в указании двух основных различий между типом физических законов классической теории и законами, которые устанавливаются опытами с квантовыми явлениями. Первое различие заключается в том, что в то время как классическая теория всегда имеет дело с *непрерывно изменяющимися величинами*, в квантовой теории мы сталкиваемся с *прерывными* или *дискретными процессами*. Второе различие заключается в следующем: в то время как классическая теория полностью определяет связь между *переменными в начальный момент* и в более поздние моменты времени (т. е. полностью механически детерминирована *)), квантовые законы определяют только *вероятности дальнейших событий* по заданным начальным условиям.

3. Дискретность квантовых процессов. Рассмотрим теперь некоторые экспериментальные доказательства, указывающие на необходимость введения в квантовую теорию понятия прерывных или дискретных процессов. Первое важное доказательство этого дает нам изучение фотоэлектрического эффекта. Мы уже видели, например, что все попытки объяснить фотоэлектрический эффект, как процесс непрерывной передачи энергии от поля излучения к веществу, потерпели неудачу; в то же время предположение о том, что эта передача энергии является прерывным процессом, который

*) Автор, говоря о динамическом характере законов классической механики, называет ее «причинной» или «детерминистической» («causal» или «deterministic»). С философской точки зрения такая терминология неправомерна, ибо законы квантовой механики также причинно обусловлены, но только несут не динамический, а статистический характер. Поэтому, как правило, ниже эти термины переводятся как механическая (динамическая) причинность или классический детерминизм (в смысле лапласовского детерминизма). — *Прим. ред.*

совершается порциями, величиной $\Delta E = h\nu$, находится в согласии со всеми опытами, относящимися к этому явлению. Кроме того, такое же предположение заключено и в гипотезе Планка, согласно которой энергия осцилляторов излучения также может иметь только дискретные значения. Таким образом, если бы передача энергии происходила непрерывно, то необходимо было бы рассматривать состояния, в которых осцилляторы излучения обладали бы частью кванта, но по гипотезе Планка такие состояния невозможны.

Как будет показано ниже, существует много других опытов, которые также требуют для своего объяснения представления о прерывности процесса передачи энергии. Сейчас мы укажем на опыт Лауренса и Бимса ([13], стр. 83), которые пытались разбить квант света на две части при помощи очень быстрого затвора, используя ячейку Керра *), которая может быть активирована в течение 10^{-9} сек. Если бы световая волна была непрерывна, как это следует по классической теории, то для применяемых интенсивностей света время прохождения полного кванта энергии было бы значительно больше, чем 10^{-9} сек. Следовательно, можно было бы ожидать, что затвор разбивал бы кванты на более мелкие порции. Однако они нашли, что ни один квант не был разбит.

Если связать гипотезу Планка с тем фактом, что никому не удалось произвести опыта по обнаружению части кванта, то можно прийти к заключению, что квант — это *неделимая порция энергии*. Из неудачи всех попыток обнаружить непрерывный характер передачи энергии можно также видеть, что переход кванта от одной системы к другой является *дискретным* процессом. Дискретность кванта энергии и процесс передачи связаны между собой; эта связь необходима для логической самосогласованности. Таким образом, нельзя считать, что в процессе передачи кванта система проходит через последовательность промежуточных состояний, в которых энергия изменяется непрерывно. Наоборот, квантовый процесс следует рассматривать как прерывный и дискретный акт. Квантовый переход является одним из основных свойств вселенной и его нельзя описать с помощью каких-то других процессов. Его можно назвать *элементарным процессом*, так же как протон и электрон называют *элементарными частицами*, потому что они не могут быть построены из других частиц **).

*) Ячейка Керра или конденсатор Керра — электрическое устройство, осуществляющее двойное лучепреломление света, основан на использовании электрооптического эффекта Керра. — *Прим. ред.*

**) Понятие «элементарности» в физике может быть применено не в смысле предела нашего познания, а лишь в смысле той границы познанных материальных связей и явлений мира, до которой дошла наука в данный период. После открытия более глубоких связей то, что мы ранее считали элементарным, перестает быть таковым. — *Прим. ред.*

4. Вероятностный характер и неполный механический детерминизм законов квантовой теории. Свойство дискретности квантовых процессов находится в полном противоречии с классической физикой, описывающей все явления как непрерывные процессы, каждое изменение в которых определяется состоянием системы, в котором они находились перед изменением. Так как классические законы применяются в предположении существования непрерывных процессов, то ясно, что прерывные квантовые скачки не могут быть предсказаны классическими законами. Следовательно, наша задача заключается в том, чтобы найти новые законы, управляющие квантовыми явлениями.

Мы подошли, таким образом, к рассмотрению второго существенного различия классических и квантовых законов. Нам известен теперь опытный факт, примером которого может служить фотоэлектрический эффект, а также и большая совокупность других опытов, еще не упоминавшихся здесь, из которых следует невозможность установления закона, точно предсказывающего место и время передачи индивидуального кванта. Вместо этого имеется возможность лишь предсказать вероятность такого процесса. Например, если на поверхность металла падает всего лишь один квант, то невозможно точно предсказать, будет ли он поглощен или нет, а если будет, то точно указать, где и когда. Но если в пучке света содержится много квантов, то по интенсивности света можно предсказать среднее число квантов, которые будут поглощаться в заданной области. Следовательно, в данном случае квантовые законы лишь управляют *вероятностью* события, но не могут с полной определенностью предсказать его *осуществление*. Мы увидим, что такой тип закона характерен не только для фотоэффекта, но он является общим для всех квантовых процессов.

Из сказанного явствует, что квантовые законы весьма сильно отличаются от классических, в которых всегда подразумевается, что поведение системы полностью описывается точными динамическими законами. Например, в классической механике все материальные частицы подчиняются уравнениям движения Ньютона $m\ddot{x} = F$. Если заданы начальное положение и скорость каждой частицы, то дальнейшее движение точно определяется дифференциальными уравнениями движения*). Таким образом, траектория электрона определяется тремя величинами:

- 1) положением в какой-либо момент времени,
- 2) скоростью в этот момент,
- 3) величиной силы F в течение всего времени.

*) Движение определяется также заданием силы, т. е. функции F во всех точках пространства и для всех моментов времени. — *Прим. ред.*

Для электрической частицы сила F определяется электрическими и магнитными полями. Эти поля могут быть точно вычислены с помощью уравнений Максвелла и начальных величин электрических и магнитных полей во всех точках пространства. Следовательно, согласно классической физике, движение заряженной частицы (так же как и любой другой частицы) может быть точно определено для всех моментов времени, если только известны начальные условия. То же самое можно сказать и относительно изменений электромагнитного поля. Поэтому классическую теорию можно назвать *полностью динамической*.

Используя эти общие принципы классической теории, можно показать, например, что в пучке света заданной интенсивности электроны получают от света энергию непрерывно и со скоростью, которую можно вычислить по интенсивности света и начальным условиям для электронов. С другой стороны, опыты показывают, что процесс передачи энергии прерывен и не определяется точными динамическими законами, по крайней мере динамическими законами классической механики. Наоборот, из опыта можно определить лишь вероятность такого процесса.

Здесь имеет смысл более детально исследовать связь между вероятностью и дискретностью квантового процесса. Прежде всего отметим уже упоминавшееся выше обстоятельство, что многие классические законы (включая законы движения Ньютона) в соответствии с принципами механического детерминизма по самой своей природе относятся к непрерывным процессам. Поэтому такого рода законы не имеют смысла для прерывных процессов и, следовательно, их нельзя непосредственно применять для объяснения квантовых переходов. Однако некоторые классические законы не требуют, чтобы частицы двигались по непрерывным траекториям в пространстве и времени. Например, к таким законам относятся законы сохранения энергии, импульса или момента количества движения. Даже в случае мгновенного столкновения, в котором движение нельзя считать непрерывным, эти законы применимы к столкновению в целом. Поэтому такие законы должны иметь смысл даже в прерывных процессах. Экспериментально доказано, что эти законы можно непосредственно перенести в квантовую теорию. Например, экспериментально было показано, что в фотоэлектрическом эффекте энергия всегда сохраняется. Многие другие опыты также подтверждают этот результат. Следовательно, не все классические динамические законы надо отбросить, а лишь те, которые требуют описания явлений при помощи непрерывных процессов.

5. Непригодность классических динамических законов в области элементарных явлений. На первый взгляд может показаться, что вероятностный характер квантовых процессов является следствием того, что мы не учли правильных независимых перемен-

ных, описывающих систему. В классической физике вероятность часто входила как раз по этой причине. Например, в термодинамике мы измеряем давление, температуру и объем данной системы. В очень маленьких областях пространства, и в особенности для состояний вблизи критической точки, эти величины больше уже не подчиняются точно уравнению состояния, а обнаруживают большие беспорядочные флуктуации около среднего значения, которое предсказывается уравнением состояния. Следовательно, в этом случае динамические законы термодинамики теряют свою силу и должны быть заменены вероятностными законами. Это произошло потому, что термодинамические независимые переменные не соответствуют больше условиям задачи и должны быть заменены новыми переменными — положением и скоростью каждой молекулы, которые с термодинамической точки зрения являются скрытыми параметрами. Термодинамические величины представляют собой усреднения этих скрытых параметров, которые не могут быть обнаружены с помощью одних только термодинамических методов. Чтобы найти основные динамические законы, мы должны перейти к описанию явлений, в которых участвуют отдельные молекулы.

В связи со сказанным сразу возникает мысль, что вероятность в квантовых процессах появляется подобным же образом. Возможно, что существуют скрытые параметры, которые фактически определяют точно время и место квантовых переходов, но мы просто еще не умеем найти их. Хотя эта возможность и не может быть абсолютно исключена, но можно показать, что она маловероятна. Во-первых, до сих пор никакой опыт не обнаружил ни малейших следов таких скрытых параметров. Во-вторых, существуют убедительные теоретические доводы против их существования. Этот вопрос будет подробно исследован позже (см. гл. 22, п. 19). Сейчас мы просто примем в качестве общего принципа, что можно определить только вероятность квантового скачка по физическому состоянию системы.

6. Принцип соответствия. Все вышеизложенное убеждает нас в необходимости введения двух неклассических представлений. Во-первых, энергетические уровни гармонических осцилляторов могут принимать лишь дискретный ряд значений $E = nh\nu$; поэтому энергетические переходы между такими осцилляторами возможны только квантами с величинами, кратными $\Delta E = h\nu$. Этот элементарный квант неделим, так что энергия или целиком находится в данном осцилляторе, или целиком вне его. Во-вторых, физическое состояние системы определяет лишь вероятность квантового перехода. Возникает вопрос, как можно согласовать эти представления с тем фактом, что в обычных макроскопических опытах движение представляется нам непрерывным и может быть описано классическими динамическими законами типа ньютоновских уравнений движения?

Кажущаяся непрерывность движения в макроскопических масштабах, конечно, есть результат малости элементарного кванта энергии. Если рассматривать процессы, включающие много квантов, то их дискретный характер становится настолько незаметным, что его нельзя обнаружить обычными экспериментальными методами. Вспомним, что в большинстве процессов классической физики имеют дело со сравнительно низкими частотами, не превышающими величины порядка 10^{10} гц. Квант энергии $\Delta E = h\nu$, соответствующий этой частоте, оказывается порядка 10^{-16} эрг, т. е. представляет собой, с точки зрения обычных макроскопических масштабов, весьма малую величину. Предположим, что мы хотим узнать характер взаимодействия между радиоволной частоты $\sim 10^{10}$ гц и электроном. Для того чтобы электрон приобрел при этом взаимодействии энергию, соответствующую той, которую он получил бы, пройдя в поле разность потенциалов всего в 1 в ($1 \text{ эв} = 1,6 \cdot 10^{-12}$ эрг), он должен поглотить 10^4 таких квантов. С другой стороны, при частоте света порядка 10^{15} гц один квант обладает энергией порядка 5 эв. Следовательно, при более высоких частотах квантование играет значительно большую роль.

Что касается ответа на вопрос, почему в макроскопических масштабах мы имеем дело как будто с точными динамическими законами, в то время как в атомных масштабах можно определить лишь вероятность каждого элементарного квантового перехода, то следует просто указать, что в процессах, где участвует много квантов, вероятность становится *почти* достоверностью (хотя и не точно достоверностью). Это очень напоминает ситуацию в статистике страховых обществ, где можно точно предсказать *среднюю* продолжительность жизни человека для большой группы людей, хотя и невозможно указать *точную* продолжительность жизни отдельных индивидуумов этой группы.

Рассмотрим опять в качестве примера взаимодействие электрона с радиоволной. Хотя существует только один электрон, но, как мы видели, он получает много квантов от осцилляторов излучения за очень короткое время. Никто не может точно предсказать, где и когда совершится переход индивидуального кванта, но в среднем даже за микросекунду происходит поглощение такого большого количества квантов, что величина средней энергии, передаваемой электрону, может быть предсказана с очень большой точностью. Таким образом, классические динамические законы в этом случае остаются справедливыми во всех практических расчетах, хотя определяется всего лишь вероятность элементарного квантового процесса.

Подобное же рассмотрение можно провести и для других классических процессов. Например, можно считать, что планета в гравитационном поле поглощает гравитационный квант, испущенный

центральной звездой (Солнцем). Этот гравитационный квант обладает гравитационным импульсом и энергией точно так же, как электромагнитный квант обладает электромагнитным импульсом и энергией. Мы представляем себе, что Солнце непрерывно испускает и вновь поглощает гравитационные кванты; таким образом, создается устойчивое состояние с определенным средним числом квантов в пространстве. Если представить себе, что планета может поглощать кванты только при условии, что они возвращаются потом к Солнцу, то мы видим, что возникает сила, составленная из бесчисленного числа мельчайших импульсов, направленная внутрь системы. Следовательно, планеты испускают кванты, которые затем поглощаются Солнцем. Таким образом, два тела притягивают друг друга и энергия сохраняется. Так как даже за очень короткий интервал времени происходит множество таких импульсов, то средняя сила будет практически постоянной.

Такое объяснение, конечно, является просто грубым приближением того, что фактически происходит в данном случае; его не надо принимать буквально, но качественно оно передает суть рассматриваемого явления. Для более точной и детальной трактовки таких вопросов необходимо изучить общую теорию квантовых силовых полей, что выходит за рамки данной книги (см. [17, 75*]).

Представления, использованные в предыдущих примерах, можно изложить более общо в форме принципа соответствия, впервые высказанного Бором. Этот принцип гласит: законы квантовой физики должны быть сформулированы таким образом, чтобы в классических границах, когда в процесс вовлечено много квантов, эти законы приводили бы к классическим уравнениям для усредненных величин. Требование удовлетворения принципу соответствия отнюдь не является тривиальным. Действительно, это требование в сочетании с дискретностью, корпускулярно-волновым дуализмом и статистическим характером квантовых законов, как мы увидим, определяет квантовую теорию почти однозначно.

7. Корпускулярные свойства света. Рассмотрим теперь более детально свет с корпускулярной точки зрения. Мы видели, что осциллятор излучения может приобретать или терять энергию только при передаче сразу целого кванта, т. е. порциями, величиной $\Delta E = h\nu$. Если осциллятор возбужден до n -го квантового состояния, то он обладает энергией $E = nh\nu$, которую он может потерять в n этапов. Тогда с энергетической точки зрения можно сказать, что существует n эквивалентных частиц, каждая с энергией $h\nu$. Эти эквивалентные частицы часто называют *фотонами*.

Естественно спросить: «Что можно сказать об импульсе этих эквивалентных частиц?» Из электродинамики следует, что поле излучения обладает наряду с энергией также и импульсом. С помощью уравнений Максвелла можно показать, что этот импульс дается

выражением

$$\mathbf{p} = \frac{1}{4\pi c} \int [\mathcal{E}\mathcal{H}] d\tau. \quad (2.2)$$

Известно, что для световой волны в вакууме векторы $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$ взаимно перпендикулярны и равны по модулю $|\mathcal{E}| = |\mathcal{H}|$. Следовательно, вектор $[\mathcal{E}\mathcal{H}]$ перпендикулярен как к $\mathcal{E}$, так и к $\mathcal{H}$, а потому совпадает с направлением распространения волны (с направлением вектора $\mathbf{k}$). Величина этого вектора равна

$$|[\mathcal{E}\mathcal{H}]| = \mathcal{E}^2 = \frac{\mathcal{E}^2 + \mathcal{H}^2}{2},$$

а так как энергия волны равна

$$E = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\mathcal{E}^2 + \mathcal{H}^2}{2} d\tau,$$

то между импульсом и энергией существует связь, даваемая формулой

$$\mathbf{p} = \frac{E}{c} \hat{\mathbf{k}}, \quad (2.3)$$

где $\hat{\mathbf{k}}$ — единичный вектор в направлении распространения*).

Конкретное доказательство существования импульса света может быть обнаружено во многих явлениях, например в давлении излучения, которое обусловлено импульсом поглощаемого света**).

Задача 1. Радиоантенна излучает в определенном направлении мощность 500 квт. Определить силу реакции на антенну в динах.

Рассмотрим теперь, как влияет на импульс излучения квантование энергии. Так как энергия квантуется в единицах $h\nu$, то импульс соответственно уравнению (2.3) должен квантоваться в единицах $h\nu/c$, или, используя (1.19), имеем

$$\mathbf{p} = \frac{h\nu}{c} \hat{\mathbf{k}} = \frac{h}{\lambda} \hat{\mathbf{k}} = \hbar \mathbf{k}, \quad (2.4)$$

где $\hbar = h/2\pi$. [Уравнение (2.4) является частным случаем соотношения де Бройля (см. уравнение (3.19)).] Энергия и импульс частицы массы m связаны соотношением

$$\frac{E^2}{c^2} = m^2 c^2 + p^2.$$

) Это соотношение может также быть получено из теории относительности (см. [18], гл. 3; [76]).

**) Это впервые было экспериментально доказано в знаменитых опытах П. Н. Лебедева (1899—1901 гг.). — *Прим. ред.*

Следовательно, связь энергии и импульса для светового кванта будет такой же, как и для частицы с нулевой массой покоя, движущейся со скоростью света.

Таким образом можно заключить, что если осциллятор излучения возбужден до своего n -го квантового состояния, то он обладает энергией $E = nh\nu$ и импульсом $\mathbf{p} = nh\mathbf{k}$, где n в каждый данный момент может изменяться только на единицу. Следовательно, энергия и импульс ведут себя как энергия и импульс совокупности n частиц, каждая из которых обладает энергией $h\nu$ и импульсом $h\mathbf{k}$. Поэтому можно определить возбужденное состояние поля излучения, определив число эквивалентных частиц, соответствующих каждому $\mathbf{k}$.

Мы видели, что электромагнитное поле может взаимодействовать с веществом только путем дискретных процессов, при которых испускается или поглощается целый квант. Если мы хотим описать эти процессы на языке эквивалентных частиц, то мы должны сказать, что взаимодействие между веществом и светом происходит только путем испускания и поглощения фотонов.

8. Эффект Комптона. Рассеяние электромагнитного излучения. Хорошо известно, что электромагнитное излучение может рассеиваться заряженными частицами, которые свободно взаимодействуют с падающей электромагнитной волной (см. [11], стр. 476; [71*], т. I, гл. IX). В квантовой теории этот процесс следует описывать как поглощение кванта падающего света и испускание другого кванта в новом направлении. Однако этот процесс может быть так же хорошо описан с помощью соотношений между энергией и импульсом, как рассеяние одной частицы, которая не уничтожается, а просто претерпевает изменение энергии и импульса.

Комптон исследовал экспериментально свойства световой частицы, изучая рассеяние рентгеновских лучей электронами. В его опыте через вещество пропусклся пучок рентгеновских лучей частоты ν . Согласно сказанному в п. 7, пучок должен действовать подобно совокупности частиц, каждая из которых обладает энергией $h\nu$ и импульсом $h\mathbf{k}$. Время от времени фотон рассеивается электроном*), отклоняясь на угол φ от направления падающего пучка с частотой ν' ; электрон при этом отклоняется на угол θ , как показано на рис. 3.

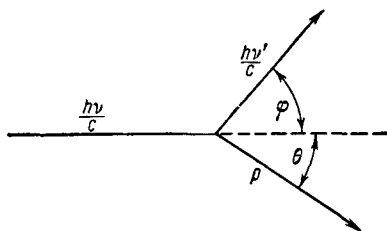


Рис. 3.

*) Энергии электронов, соответствующие их движению по атомным орбитам, гораздо меньше энергии фотонов рентгеновских лучей, и поэтому ими здесь можно пренебречь.

Все эти величины можно наблюдать экспериментально. Если в индивидуальном процессе рассеяния энергия и импульс сохраняются (что должно быть, если кванты рентгеновских лучей действуют подобно частицам), то можно показать, что

$$\lambda' - \lambda = \frac{2h}{mc} \sin^2 \frac{\varphi}{2}, \quad (2.5)$$

где m — масса электрона.

Задача 2. Доказать справедливость уравнения (2.5).

Отношение h/mc называется *комптоновской длиной волны* электрона. (Величина ее равна $2,42 \cdot 10^{-10}$ см.) Заметим, что рассеянный квант всегда имеет большую длину волны, чем падающий квант.

Опыты Комптона подтвердили справедливость уравнения (2.5) и тем самым продемонстрировали, что энергия и импульс света квантуются как $E = h\nu$, $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, а также, что они сохраняются при индивидуальных процессах рассеяния. Законы сохранения могут быть проверены более полно, если исследовать электроны отдачи. Соответствующие измерения показали, что при этом электроны приобретают те же самые импульс и энергию, которые теряет фотон.

9. Анализ эффекта Комптона. При детальном анализе этого эксперимента можно продемонстрировать сложные и тонкие соотношения между классической и квантовой теориями, которые вытекают из принципа соответствия.

Для этого прежде всего рассмотрим классическое объяснение явления рассеяния световых волн электроном. Согласно классической теории, падающая световая волна создает гармонически колеблющееся электрическое поле $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \sin \omega t$, которое приводит электрон в колебательное движение и заставляет его тем самым излучать симметрично относительно плоскости, нормальной к направлению падающего излучения. Полный импульс излучаемого электроном света равен нулю, поэтому импульс, который теряется падающим пучком света, должен перейти к электрону. Это создает давление излучения на электрон, которое вызывает его ускорение. Величину полной силы излучения, действующей на электрон, можно вычислить по формуле, выведенной Томсоном ([19], стр. 321; [11]; стр. 477) для скорости рассеяния энергии в падающем пучке интенсивности I (выраженной в эрг/см² сек):

$$\frac{dW}{dt} = \frac{8\pi e^4}{3m^2 c^4} I.$$

Так как импульс, поглощенный от пучка, равен W/c , то скорость получения электроном этого импульса определяется выражением

$$\frac{dP}{dt} = \frac{8}{3} \frac{\pi e^4}{m^2 c^5} I. \quad (2.6)$$

Мы можем получить более наглядную картину механизма возникновения давления излучения, если рассмотрим волну, падающую в направлении z , с электрическим полем, направленным вдоль оси x и магнитным полем вдоль оси y . До сих пор мы пренебрегали магнитными силами, потому что полная сила равна $e\mathcal{E} + \left[\frac{v}{c} \mathcal{H}\right]$, а так как в вакууме $|\mathcal{E}| = |\mathcal{H}|$, то член, содержащий множитель v/c , оказывает лишь очень малое влияние на движение, если только электрон не движется со скоростью, близкой к скорости света. Если $v/c \ll 1$, как это обычно имеет место, то можно решать задачу о движении электрона в первом приближении, пренебрегая членом $\left[\frac{v}{c} \mathcal{H}\right]$, и затем перейти к следующему приближению, учитывая этот член как возмущение. Тогда мы находим, при усреднении за один период, что средняя электрическая сила, действующая на электрон, исчезает, но в направлении z остается не исчезающая во времени компонента магнитной силы. Вычисления показывают, что она равна значению, определяемому уравнением (2.6).

Задача 3. Известно, что электрон в электромагнитном поле подчиняется следующему уравнению движения:

$$m\ddot{\mathbf{x}} = e\mathcal{E} + \left[\frac{e\mathbf{v}}{c} \mathcal{H}\right] - \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \ddot{\mathbf{x}}.$$

Последний член представляет собой силу, возникающую от обратного действия на электрон излученного им поля [20]. Предполагая, что $\mathcal{E}_x = \mathcal{E}_0 \sin \omega t$ и $\mathcal{H}_y = \mathcal{E}_0 \sin \omega t$, решить эти уравнения для случая стационарных колебаний электрона, пренебрегая магнитными силами. Показать, что при таком движении средняя электрическая сила исчезает, а средняя магнитная сила имеет неисчезающую компоненту в направлении z , по величине равную значению, определяемому уравнением (2.6). При решении следует использовать неравенство

$$\frac{e^2}{mc^3} \ll \tau = \frac{2\pi}{\omega}.$$

Поскольку электрон приобретает скорость, то в результате возникает результирующее доплеровское смещение в сторону более низких частот. Это смещение состоит из двух частей. Во-первых, электрон удаляется из светового пучка, так что он испытывает действие поля с частотой более низкой, чем частота падающего света. Кроме того, в процессе излучения возникает другое доплеровское смещение, которое гасит первое в направлении движения и удваивает его в обратном направлении. Действительно, можно показать, что угловая зависимость доплеровского смещения точно равна выражению, даваемому уравнением (2.5) для эффекта Комптона (см. уравнение (2.7a)).

Задача 4. Предположим, что электрон, первоначально находившийся в покое, подвергается в течение времени T действию светового луча с интенсивностью I и длиной волны λ_0 . Показать, что доплеровское смещение (в нерелятивистской теории, где $v/c \ll 1$) равно

$$\lambda - \lambda_0 \cong 2\lambda_0 \frac{v}{c} \sin^2 \frac{\varphi}{2}, \quad (2.7a)$$

где v — скорость электрона. Показать также, что доплеровское смещение равно

$$\lambda - \lambda_0 \cong \frac{2W\lambda_0}{mc^2} \sin^2 \frac{\varphi}{2}, \quad (2.76)$$

где W — полная энергия, полученная от падающего света.

Согласно классической теории, это доплеровское смещение должно постепенно возрастать со временем, поскольку частица получает энергию. Кроме того, частица могла бы получать любое количество энергии, поэтому было бы возможно наблюдать все возможные величины для доплеровского смещения под заданным углом наблюдения и при изменении интенсивности излучения или времени экспозиции. Однако в опытах было обнаружено, что при заданном угле наблюдается только одно значение смещения длины волны независимо от интенсивности излучения и времени облучения. Эти факты указывают на то, что процесс передачи энергии и импульса не является непрерывным, как это предсказывает классическая теория, а является дискретным, как следует из квантовой теории.

Рассмотрим теперь как объясняется в рамках квантовой теории предельный классический случай. Предположим, например, что электрон сталкивается с радиоволной, несущей много квантов. Электрон рассеивает эти кванты, но максимально возможное увеличение длины волны при единичном процессе равно 10^{-11} см и представляет собой слишком маленькую величину, чтобы ее можно было обнаружить в радиоволнах с длиной порядка сантиметров или больше. С другой стороны, частица продолжает получать энергию, поскольку она сталкивается со все большим и большим числом квантов и в конце концов скорость становится настолько большой, что доплеровское смещение становится заметным. Таким образом, мы получаем доплеровское смещение, которое возрастает как бы непрерывно, как этого требует классическая теория. (Однако в рентгеновских лучах относительное смещение длины волны при одном квантовом процессе заметно, и поэтому квантовые дискретные эффекты становятся существенными.)

В некоторых частных случаях смещение частоты может быть вычислено квантовомеханически из законов сохранения энергии и импульса, а также соотношения Эйнштейна — де Бройля *) ($E = h\nu$, $p = h\nu/c$). Для этого требуется только определить комптоновское смещение фотона с начальной частотой ν_0 , рассеянного электроном, который движется первоначально с импульсом p_0 . Упростим задачу, предположив, что начальный импульс частицы имеет направление, совпадающее с направлением падающего фотона. Изменение длины

*) Происхождение термина «соотношение де Бройля» объясняется в гл. 3, п. 8.

волны тогда равно

$$\lambda_0 - \lambda = \frac{2(h + \lambda_0 p_0)}{V m^2 c^2 + p_0^2 - p_0} \sin^2 \frac{\varphi}{2}. \quad (2.7в)$$

Задача 5. Вывести уравнение (2.7в).

Чтобы получить классический предел, надо предположить, что изменение импульса δp , происходящее за время дискретного процесса рассеяния, мало по сравнению с p_0 . Для нерелятивистского случая ($v/c \ll 1$) это изменение импульса будет порядка $h\nu_0/c = h/\lambda_0$, так что в классическом пределе

$$\frac{h}{\lambda_0} \ll p_0 \quad \text{или} \quad \lambda_0 p_0 \gg h.$$

Следовательно, уравнение (2.7в) переходит в

$$\lambda_0 - \lambda \cong 2\lambda_0 \frac{v_0}{c} \sin^2 \frac{\varphi}{2}$$

в согласии с классическим выражением, даваемым формулой (2.7а).

Замечательно, что значения доплеровского смещения, вычисленные из квантотеоретических предположений о *дискретности* процесса рассеяния, совпадают в классическом пределе со значением, полученным из классической теории на основе совершенно иного описания, включающего, кроме всего прочего, предположение, что этот процесс *непрерывен*. Легко видно, что причина такого совпадения заключена в самой природе соотношений Эйнштейна — де Бройля, которые связывают изменения энергии и импульса, вызванные дискретным квантовым процессом с изменениями частоты и длины волны, обусловленными непрерывным классическим процессом. Поэтому даже на этой ранней стадии развития квантовой теории объяснение комптоновского и фотоэлектрического эффектов при помощи дискретных квантовых процессов не только приводит к согласию с экспериментами, на которых основывается такое объяснение, но также дает правильное приближение в классическом пределе. Это первый пример, показывающий, что применение принципа соответствия далеко не тривиально (см. п. 6). По мере развития дальнейшего изложения станет еще более очевидной тесная связь по принципу соответствия между классической и квантовой теориями.

Интересно отметить, что можно получить правильное квантовомеханическое выражение для смещения частоты, если подставить величину $W = h\nu$ в уравнение (2.7б), выведенное классическим путем. На основании этого результата с наивной точки зрения можно считать классическим рассеяние излучения электроном, с тем лишь исключением, что по каким-то причинам он взаимодействует только с порциями энергии, величиной $h\nu$. (Это предположение очень похоже на неудачное объяснение фотоэлектрического эффекта, приведенное в п. 1.) Однако если бы эффект Комптона осуществлялся таким

образом, то смещение частоты при ускорении электрона должно было бы изменяться непрерывно, от нуля до максимального значения. Следовательно, не было бы согласия с опытом, в котором получается, что заданному значению угла рассеяния соответствует лишь одна определенная величина смещения частоты в согласии с гипотезой дискретности процесса рассеяния.

Получение правильного значения для комптоновского смещения при постановке кванта энергии $W = h\nu$ в уравнение (2.76) нужно понимать лишь в смысле принципа соответствия, но это не является строгим выводом. Дело здесь заключается в том, что эффект квантования в основном сводится лишь к ограничениям изменений энергии на величины, кратные кванту $h\nu$, если принять во внимание эффекты дисперсности в классическом пределе. Конечно, комптоновский эффект обычно наблюдают вдали от классического предела, но для него случайно оказывается, что результаты, полученные экстраполяцией описанной выше процедуры в квантовую область, правильны, несмотря на то, что эта процедура справедлива только в классическом пределе. В большинстве случаев, как будет видно из следующих пунктов этой главы, такая грубая экстраполяция приводит лишь к приближенным формулам, которые могут отличаться от точных на численный множитель, порядка 2 или 3, на которые дают в общем правильный порядок величины для оценки квантовомеханических эффектов. В связи с этим укажем, что единственно строгим выражением принципа соответствия для доплеровского смещения является уравнение (2.7в).

Принцип соответствия применим не только к определению смещения частот, но также и для расчета средней энергии излучения. Мы знаем (см. пп. 3 и 4), что квантовые законы дают лишь вероятность дискретных процессов передачи энергии от поля излучения к электрону, в то время как классические законы дают динамически определенные выражения для скорости непрерывного перехода энергии. В классическом пределе, когда в процессе участвует много квантов, средняя скорость передачи энергии, вычисляемая с помощью квантовых вероятностей, должна совпадать с точной скоростью перехода энергии, вычисленной из ньютоновского закона движения. Поэтому вероятность рассеяния квантов за единицу времени S должна быть выбрана таким образом, чтобы средний импульс, поглощенный за единицу времени, был равен классической скорости поглощения, а именно

$$S \frac{h\nu}{c} = \frac{1}{c} \frac{dW}{dt} \quad \text{или} \quad S = \frac{8\pi e^4}{3h\nu m^2 c^4} I.$$

При таком выборе получаются правильные классические динамические законы, применимые в данном случае, поскольку рассеивается так много квантов, что отклонение действительного результата от вероятного становится исчезающе малым.

Задача 6. Задан пучок рентгеновских лучей частоты $\nu = 10^{21}$ гц с интенсивностью 1 вт/см^2 . Какова вероятность рассеяния от одного электрона одного кванта за 1 сек? Сравните результат с тем, который был получен для электромагнитной волны частоты 1 гц, и с той же интенсивностью. В каком случае применимы динамические законы?

Квантование атомных систем

В связи с проблемой удельной теплоемкости твердых тел уже было показано, что гармонические осцилляторы вещества могут обладать энергиями, которые квантуются так же, как энергии осцилляторов излучения. Кроме того, при рассмотрении фотоэлектрического и комптоновского эффектов выяснилось, что классические законы сохранения энергии применимы для *каждого* отдельного квантового перехода между излучением и веществом. Если при этом вспомнить, что равновесное распределение излучения абсолютно черного тела не зависит от вещества стенок, то необходимо сделать вывод, что *всякое* вещество может поглощать энергию излучения только квантами, величиной $\Delta E = h\nu$. Рассмотрение свойств фотоэлектрического и комптоновского эффектов подтвердило этот вывод в более непосредственной форме. Можно получить простейшее объяснение этих явлений, если предположить, что энергетические уровни *всякого* вещества ограничены дискретными значениями. Когда Бор впервые высказал эту идею, она казалась неправдоподобной, но теперь имеется множество доказательств, которые ее подтверждают.

10. Доказательство квантования всех атомных систем. Кроме высказанных выше соображений, указывающих на правдоподобность идеи квантования, имеется и ряд строгих экспериментальных доказательств, подтверждающих существование дискретных энергетических уровней у всех атомных систем.

Прежде всего здесь следует упомянуть проблему устойчивости атомов. Согласно классической теории, ускоряющийся электрон всегда излучает энергию со скоростью, равной $\frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} |\ddot{\mathbf{x}}|^2$. Электроны на атомных орбитах всегда ускоряются и поэтому должны непрерывно терять свою энергию, пока они не упадут на ядро. В действительности же известно, что они перестают излучать задолго до того, как это может произойти. Этот факт убедительно доказывает, что существует минимальное возможное значение энергии в атоме, соответствующее наинижнему дискретному квантовому энергетическому состоянию, и что излучение прекращается после достижения этого состояния.

Согласно классической теории, электрон на каждой данной орбите должен был бы излучать свет с частотой, равной или частоте вращения по орбите, или какой-либо гармонике этой частоты. Если, например, электрон движется по круговой орбите с постоянной по величине скоростью, то излучается только одна основная частота. Однако в случае сильно вытянутой эллиптической орбиты частица заметно ускоряется при приближении к ядру, и это создает острый импульс излучения, который периодически повторяется. Этот острый

импульс создает в излучаемом свете соответствующие гармоники основной частоты.

Частота вращения зависит от размеров и формы орбиты, которые, согласно классической механике, непрерывно изменяются. Следовательно, в спектре, испускаемом возбужденным атомом, должно быть непрерывное распределение частот. В действительности же каждый тип атома испускает дискретную группу частот*), характерных для данного атома. Если бы в атоме существовала последовательность дискретных энергетических уровней, подчиняющихся соотношению $\Delta E = h\nu$, то можно было бы легко объяснить наличие дискретных частот в спектре испускания.

Кроме того, согласно классической физике, при испускании заданной частоты ν могут также появиться различные ее гармоники, зависящие, как мы видели, от характера орбитального движения. В действительности же наблюдаются группы частот, которые имеют тенденцию совместного существования, если только они не относятся друг к другу как гармоники. Опыты показывают, что если существует две каких-то линии с частотами ν_1 и ν_2 , то имеются

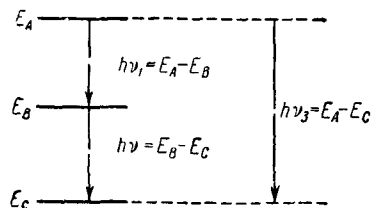


Рис. 4.

также и частоты $\nu_1 + \nu_2$ или $\nu_1 - \nu_2$. Это правило комбинации частот известно под названием *комбинационного принципа Ридберга—Ритца*. Оно хорошо согласуется с представлением, что в атоме имеются соответствующие энергетические уровни, как это показано на рис. 4.

Мы увидим позже, что комбинационный принцип Ридберга—Ритца является квантовомеханической аналогией гармоник в классической теории; действительно, в классическом пределе высоких квантовых чисел этот принцип приводит к предсказанию излучения гармоник основной частоты.

Существует множество доказательств того, что все виды движения ограничиваются квантованными энергетическими уровнями. Однако расстояние между уровнями в общем случае совсем не обязательно должно быть одинаковым, как в случае гармонического осциллятора. В действительности, например, из рассмотрения линий атомных спектров видно, что они не находятся на одинаковом расстоянии друг от друга.

11. Определение энергетических уровней. Наша следующая задача заключается в определении расстояния между энергетическими

*) Так как каждой частоте соответствует линия в спектре атома, то этот результат означает, что спектр атома дискретен, в то время как классическая физика предсказывает непрерывный спектр.

уровнями. Для изучения этого вопроса ограничимся вначале системой с одной степенью свободы, которая совершает ангармоническое периодическое движение. Такой системой может быть, например, ангармонический осциллятор (в котором квазиупругая сила не пропорциональна смещению) или электрон в атоме водорода. Для ангармонического движения характерна зависимость периода от амплитуды и, следовательно, энергии. Например, период маятника возрастает с ростом амплитуды, также возрастает период вращения электрона в атоме при увеличении радиуса орбиты. Следовательно, в общем случае $\nu = \nu(E)$, и только для гармонического осциллятора частота ν не зависит от энергии E .

Выясним прежде всего, как определяются энергетические уровни. Известно, что расстояние между уровнями равно $\Delta E = h\nu$, где ν — частота излучаемого света. Но в классическом пределе ν есть определенная функция E , которая может быть вычислена из уравнений движения. Если справедлив принцип соответствия, то эти две частоты должны совпадать по крайней мере в классическом пределе при больших квантовых числах, следовательно *),

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

Принципиально энергетические уровни уже определены этой формулой. Отсчитывая энергию от произвольного нулевого значения, получаем для энергии n -го состояния

$$E_n = \sum_0^n \Delta E_n = \sum_{n'}^n h\nu(E_n) + K, \quad (2.8)$$

где n' — целое число, достаточно большое, чтобы оставаться в классической области, а K — произвольная постоянная.

В уравнении (2.8) остается некоторая неоднозначность, так как величина ΔE_n связана с двумя энергетическими уровнями, и мы точно не знаем, каким из них пользоваться при вычислении $\nu(E_n)$. Наилучшей, по-видимому, является средняя величина. В классическом пределе эта неоднозначность несущественна, потому что $\Delta E_n \ll E_n$, и, вообще говоря, она становится существенной только тогда, когда изменение частоты $\Delta\nu$, возникающее вследствие изменения энергии $\Delta E = h\nu$, становится сравнимым с ν или когда

$$h \frac{\partial \nu}{\partial E} \cong 1.$$

*) Заметим, что приводимые здесь аргументы весьма похожи на применявшиеся при обсуждении эффекта Комптона в п. 9. В частности, вычисление смещения частот (а следовательно, изменений энергий) из классически выведенного уравнения (2.76) в предположении, что изменение энергии (в данном случае W) равно $h\nu$, весьма напоминает вычисление разности энергии ΔE по классически вычисленной частоте $\nu(E)$.

Для гармонического осциллятора, где $\partial \nu / \partial E = 0$, этот метод квантования правилен для всех энергий. Даже если $\hbar (\partial \nu / \partial E) \cong 1$, то метод может дать по крайней мере оценку величины энергии.

Существует несколько более изящный метод для оценки энергетических уровней, который также имеет смысл рассмотреть для того, чтобы еще раз подчеркнуть связь между классической и квантовой механикой. Определим прежде всего функцию

$$J_n = \sum_{n'}^n \frac{\Delta E_n}{\nu(E_n)} + J_{n'}, \quad (2.9)$$

где n' — опять достаточно большое число.

По определению, функция J_n изменяется на величину $\hbar$, если n изменяется на единицу. Однако в классическом пределе J_n испытывает только маленькое относительное изменение, когда n изменяется на единицу, и, как мы видели, относительное изменение $\nu(E_n)$ также весьма мало. Поэтому конечную разность ΔE_n можно заменить приближенно дифференциалом, а сумму — интегралом. В результате получаем

$$J(E) = \int_{E_0}^E \frac{dE}{\nu(E)} + J(E_0). \quad (2.10)$$

Дифференцирование дает

$$\frac{dJ}{dE} = \frac{1}{\nu(E)} = T(E),$$

где $T(E)$ — период. С классической точки зрения $J(E)$ является полностью определенной функцией, способной принимать непрерывные значения. Однако, согласно квантовой теории, она может принимать только дискретные значения, отличающиеся друг от друга на величину $\hbar$. Это общее условие квантования. Для гармонического осциллятора $\nu(E)$ не зависит от E . Следовательно, $J = E/\nu$ и $\Delta J = \hbar = \Delta E/\nu$. Это обычное квантовое условие для гармонического осциллятора. Хотя этот метод определения энергетических уровней строг только для классического предела, он дает приблизительно правильные результаты, даже если величина E_0 попадает в более низкую квантовую область.

12. Переменная действия. Величиной J широко пользовались в классической механике еще до появления квантовой теории, она называется *переменной действия*. Обычная формула для J имеет вид

$$J = \oint p dq, \quad (2.11)$$

где p — импульс, сопряженный координате q . Интеграл берется по траектории, фактически проходимой частицей за время одного периода колебания. Такой интеграл называется *фазовым интегралом*.

Легко показать для частного случая, когда $p = \sqrt{2m[E - V(q)]}$, где $V(q)$ — потенциал, что это определение эквивалентно предыдущему. Для этого заметим, что q колеблется между предельными значениями, являющимися функциями энергии. Так как частица проходит от одного максимального отклонения к другому и обратно, то фазовый интеграл точно равен удвоенной величине интеграла, взятого между пределами колебания

$$J = 2 \int_{a(E)}^{b(E)} dq \sqrt{2m[E - V(q)]}.$$

Найдем теперь $\frac{\partial J}{\partial E}$. По хорошо известной теореме математического анализа получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial E} &= 2 \left\{ \sqrt{2m[E - V(q)]} \right\}_{q=b} \frac{\partial b}{\partial E} - \\ &- 2 \left\{ \sqrt{2m[E - V(q)]} \right\}_{q=a} \frac{\partial a}{\partial E} + 2 \int_a^b \sqrt{\frac{m}{2[E - V(q)]}} dq. \end{aligned}$$

Вспомним, что максимальные отклонения при колебании должны определяться тем, что кинетическая энергия в них равна нулю, т. е. $E = V$. Следовательно, выражения в фигурных скобках исчезают, и так как $\sqrt{\frac{2(E - V)}{m}} = \frac{dq}{dt}$, то находим

$$\frac{\partial J}{\partial E} = 2 \int_a^b \frac{dq}{\frac{dq}{dt}} = 2 \int_a^b dt = T, \quad (2.12)$$

где T — период. Это показывает, что функция J , определенная уравнением (2.11), совпадает с функцией J из вышеприведенного уравнения (2.10) с точностью до постоянной интегрирования, которая для наших целей несущественна.

Квантование действия J обычно называют «квантовым условием Бора — Зоммерфельда».

13. Квантование момента количества движения. Применим теперь наше правило к простому случаю частицы, движущейся в плоскости с полярным углом φ и с определенным угловым моментом p_φ . Если потенциал сферически симметричен, то известно, что этот угловой момент является постоянной движения. Координатой,

сопряженной с p_φ , является сам угол φ . За время одного периода угол φ изменяется от 0 до 2π , так что

$$J = \int_0^{2\pi} p_\varphi d\varphi = p_\varphi \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi p_\varphi. \quad (2.13)$$

Тогда квантование J означает, что

$$\Delta J = h = 2\pi \Delta p_\varphi \quad \text{или} \quad \Delta p_\varphi = \frac{h}{2\pi} = \hbar.$$

Поэтому угловой момент может изменяться только на величину $\hbar = h/2\pi$.

14. Атом водорода. Рассмотрим теперь задачу квантования электрона, движущегося в поле, создаваемом точечным зарядом, например ядром атома водорода. Эта задача впервые была решена Нильсом Бором, который получил правило квантования моментов количества движения, пользуясь принципом соответствия. Приведем здесь общий ход рассуждений, при помощи которых это можно сделать непосредственно, без ссылки на квантование действия J . В классической теории энергия в данном случае равна

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r}. \quad (2.14)$$

Для круговой орбиты сила притяжения уравнивается центробежной силой. Это дает

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2} \quad \text{или} \quad \frac{Ze^2}{r} = mv^2. \quad (2.15)$$

Производя замену $mv r = p_\varphi$, находим

$$v p_\varphi = Ze^2.$$

Поэтому энергия имеет вид

$$E = -\frac{mv^2}{2} = -\frac{m}{2} \frac{(Ze^2)^2}{p_\varphi^2}. \quad (2.16)$$

Рассмотрим теперь переход с орбиты, для которой $p_\varphi = p_{\varphi_1}$, на орбиту с $p_\varphi = p_{\varphi_2}$. Согласно соотношению Эйнштейна $\Delta E = \hbar \nu$, мы должны получить

$$\Delta E = \hbar \nu = -\frac{m}{2} (Ze^2)^2 \left(\frac{1}{p_{\varphi_1}^2} - \frac{1}{p_{\varphi_2}^2} \right). \quad (2.17)$$

Для высоких квантовых состояний должно иметь место совпадение между частотой, вычисленной квантовомеханически, и классической частотой, которая равна частоте вращения по орбите, т. е. $\nu = v/2\pi r$. Кроме того, относительное отклонение углового момента будет при

этом настолько мало, что разность в уравнении (2.17) можно заметить дифференциалом. Это дает

$$\frac{\hbar v}{r} \simeq \frac{m (Ze^2)^2 \Delta p_\varphi}{(p_\varphi)^3},$$

где Δp_φ означает изменение p_φ . Так как $p_\varphi = mvr$, то эта формула дает

$$\frac{\hbar v}{r} = \frac{(Ze^2)^2}{m^2 v^3 r^3} \Delta p_\varphi.$$

Из уравнения (2.15) легко получается $\frac{v}{r} = \frac{(Ze^2)^2}{m^2 v^3 r^3}$ и $\Delta p_\varphi = \hbar$ или

$$p_\varphi = l\hbar + K, \quad (2.18)$$

где l — целое число, а K — постоянная величина. Это совпадает с результатом, полученным из условия Бора — Зоммерфельда, которое исторически было выведено позже. Оба результата должны, конечно, совпадать, так как они выведены из принципа соответствия.

Затем Бор интуитивно предположил, что уравнение (2.18) справедливо даже в случае очень малых квантовых чисел. До сих пор определялись только изменения в p_φ . Поэтому мы писали $p_\varphi = l\hbar + K$, где K — постоянная. Однако допускаемые значения p_φ должны быть те же самые для положительных и отрицательных значений. Это можно видеть из того факта, что в правовинтовой системе координат знак углового момента противоположен знаку углового момента, вычисленного в левовинтовой системе координат. Следовательно, при изменении системы координат с правой на левую меняется знак углового момента. Но конечные результаты теории не должны зависеть от выбора той или иной системы координат. А это означает, что если данное значение углового момента является допустимым, то должно быть допустимым и его отрицательное значение. Если положить $K=0$, то этот критерий будет выполнен, потому что допустимые значения будут $p_\varphi = l\hbar$. При $K = 1/2 \hbar$ допустимые значения

будут $p_\varphi \left(l + \frac{1}{2} \right) \hbar$ или $\left(\dots - \frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \right) \hbar$,

так что наше требование также удовлетворяется. Однако при любом другом значении K этому условию уже нельзя удовлетворить. Например, при $K = 1/4 \hbar$ получаются следующие допустимые значения: $\left(\dots - 1\frac{3}{4}, -\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, 1\frac{1}{4}, 2\frac{1}{4}, \dots \right) \hbar$, которые не совпадают при изменении знака углового момента.

Для получения согласия с наблюдаемыми спектрами нужно принять $p_\varphi = l\hbar$. [Квантовое число, равное половине целого числа, появится позже в других задачах в связи с приближением Вентцеля—

Крамерса — Бриллюэна (гл. 12) и при учете спина электрона (гл. 17).] Тогда из уравнения (2.16) получаем

$$E = -\frac{m}{2} \frac{(Ze^2)^2}{\hbar^2 l^2} = -\frac{Rch}{l^2}, \quad (2.19)$$

где R — постоянная Ридберга. Частота излучения, испускаемого при переходе, равна

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = Rc \left(\frac{1}{l_2^2} - \frac{1}{l_1^2} \right). \quad (2.20)$$

Эта формула не только объяснила закономерность известного спектра водорода (и однократно ионизированного гелия), но также предсказала новые серии частот испускаемого излучения, которые в то время не были известны. Таким образом, квантовая теория еще раз сумела дать количественное согласие с широкой областью экспериментальных фактов, к объяснению которых классическая физика не могла даже приступить.

Радиус орбиты электрона равен

$$a = -\frac{Ze^2}{2E} = \frac{\hbar^2}{mZe^2} l^2. \quad (2.21)$$

Для наинизшей круговой орбиты имеем $l=1$. (Значение $l=0$ приводит в данном случае к абсурду. Однако позже мы убедимся, что первоначальная теория Бора не решала правильно вопрос об определении наинизших квантовых состояний и что возникшие в связи с этим трудности квантовой теории были разрешены с помощью уравнения Шрёдингера.) Радиус этой орбиты, называемый *боровским радиусом*, обычно обозначают символом a_0 . $a_0 = 0,528 \cdot 10^{-8}$ см. Поэтому для l -й орбиты имеем $a = l^2 a_0$, где $a_0 = \frac{\hbar^2}{mZe^2}$. Таким образом, радиусы последующих орбит возрастают как квадраты квантовых чисел.

Для полного решения задачи атома водорода следует также разобрать и случай эллиптических орбит. На эллиптической орбите радиус периодически колеблется с частотой вращения. Следовательно, можно применить условия Бора — Зоммерфельда для квантования «радиальной переменной действия»

$$J_r = \oint p_r dr, \quad (2.22)$$

где p_r — радиальная составляющая импульса.

Для вычисления p_r воспользуемся следующим соотношением:

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}. \quad (2.23)$$

Так как сила сферически симметрична, то величина p_φ является постоянной движения. Следовательно, величина $p_\varphi^2/2mr^2$ ведет себя как добавочный отталкивающий член в потенциале, стремящийся удерживать частицы подальше от начала координат. Действительно, «центробежная сила» может быть получена дифференцированием этого члена по величине r :

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{p_\varphi^2}{2mr^2} \right) = \frac{p_\varphi^2}{mr^3} = mr\varphi^2 = \frac{mv_\varphi^2}{r}.$$

Здесь v_φ — компонента скорости в направлении φ .

Решая это уравнение относительно p_r , получаем

$$J_r = 2 \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2mE + \frac{Ze^2}{r} - \frac{p_\varphi^2}{r^2}} dr. \quad (2.24)$$

Область интегрирования заключена между минимальным и максимальным значениями радиуса. Так как эти значения осуществляются при $p_r = mr = 0$, то эта область лежит между точками, в которых подынтегральное выражение равно нулю. Интеграл можно вычислить, и результат равен

$$J_r = -2\pi p_\varphi + 2\pi Ze^2 \sqrt{\frac{m}{-2E}}. \quad (2.25)$$

Задача 7. Вывести полученный результат.

Решая уравнение (2.25) относительно E , находим

$$E = -\frac{m}{2} \frac{(Ze^2)^2}{\left(\frac{J_r}{2\pi} + p_\varphi\right)^2} = -\frac{m}{2} \frac{(2\pi)^2 (Ze^2)^2}{(J_r + J_\varphi)^2}, \quad (2.26)$$

где $J_\varphi = 2\pi p_\varphi$.

Теперь мы знаем, что $J_\varphi = lh$, и мы должны также иметь $J_r = sh^*$), где s — целое число, называемое «радиальным квантовым числом». Полная энергия равна

$$E = -\frac{m}{2} \frac{(Ze^2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{(l+s)^2}. \quad (2.27)$$

Обычно вводят главное квантовое число n :

$$l+s=n, \quad (2.28)$$

*) В действительности следовало бы взять $J = s\hbar + k$, где k — постоянная, но мы здесь выбрали $k=0$. Поэтому этот вывод строго применим только для больших квантовых чисел, но оказывается, что он приводит к правильным результатам также и в случае малых квантовых чисел.

и тогда полная энергия имеет вид

$$E = -\frac{m}{2} \frac{(Ze^2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{Rch}{n^2}. \quad (2.29)$$

Мы видим, что разрешенные энергетические уровни оказываются точно такими же, как и для круговых орбит. Энергия зависит явно только от главного квантового числа n , а не в отдельности от l или s . Следовательно, для каждого значения n можно получить ряд орбит с одинаковой энергией, если l пробегает все возможные значения от 1 до n , в то время как s принимает соответствующие значения от $n-1$ до 0.

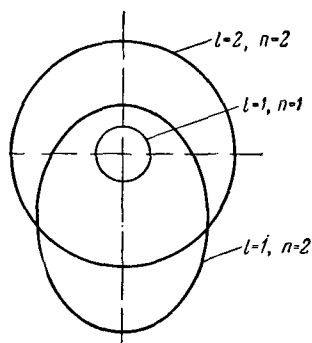


Рис. 5.

Для выяснения вида этих орбит воспользуемся тем, что энергия электронной орбиты является функцией лишь величины больших полуосей, а не эксцентриситета (см. [13], гл. 5; [71*], т. I, гл. VIII). Следовательно, все орбиты с одинаковой энергией являются эллипсами с теми же большими полуосями. Мы уже видели, что для $l=n$ получаются круговые орбиты. При $l < n$ получаем эллипсы, которые имеют больший эксцентриситет для меньших значений l .

Перечислим несколько первых орбит. Для $n=1$ существует только одна возможность $l=1$ — это круговая орбита. Однако для

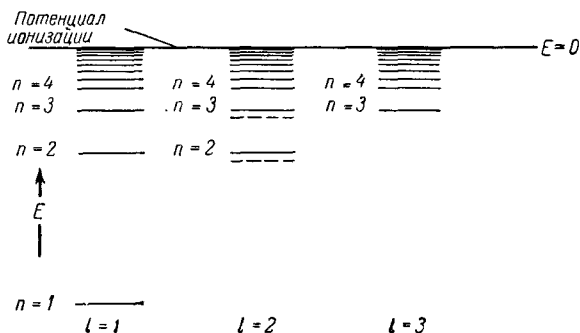


Рис. 6.

$n=2$ возможны значения $l=2$ или $l=1$. Первая орбита круговая, вторая — эллиптическая. Форма орбит для первых двух энергетических уровней показана на рис. 5. Мы видим, что для больших n орбиты быстро возрастают и становятся более многочисленными.

Квантовые состояния обычно изображаются на диаграмме энергетических уровней (рис. 6). Величина энергии относительно нуля дается положением линии. Для водорода эти величины показаны сплошными линиями для первых трех значений l . По мере приближения к значению энергии $E=0$ плотность линий стремится к бесконечности. Для $E>0$ электрон свободен, так что в действительности мы имеем ион и электрон. Энергия, требуемая для освобождения электрона, находящегося первоначально на самом низком энергетическом уровне, называется *потенциалом ионизации*. Для водорода он равен отрицательному значению энергии, получаемой из уравнения (2.29) при подстановке $n=1$, т. е. величине $E=Rch$.

Единственными типами сил, для которых орбиты с данным главным квантовым числом n , но с различными азимутальными числами l всегда обладают одинаковой энергией, являются кулоновские силы притяжения и трехмерный простой гармонический осциллятор. В обоих случаях этот результат тесно связан с тем, что частота, с которой радиус возвращается к своему первоначальному значению, совпадает с частотой изменения угла на 2π . Чтобы доказать это для кулоновской силы, заметим, что частота радиальных колебаний равна $\nu_r = \partial E / \partial J_r$, а частота изменения угла на величину 2π равна $\nu_\varphi = \partial E / \partial J_\varphi$. Из уравнения (2.26) следует, что

$$\frac{\partial E}{\partial J_r} = \frac{\partial E}{\partial J_\varphi},$$

так что $\nu_r = \nu_\varphi$. Тогда для допустимых изменений энергии можно записать

$$\Delta E \cong \frac{\partial E}{\partial J_r} \Delta J_r + \frac{\partial E}{\partial J_\varphi} \Delta J_\varphi = h(\nu_r \Delta s + \nu_\varphi \Delta l),$$

или

$$\Delta E = h\nu(\Delta s + \Delta l). \quad (2.30)$$

Если начать с основного состояния $l=1$, $n=1$ (или $s=0$), то мы приходим к тому же значению энергии независимо от того, увеличивается ли на единицу s или l . Точно так же величина следующего интервала энергии не зависит от того, возрастает ли s или l . Таким образом, во всех случаях полное изменение энергии зависит только от главного квантового числа $n = s + l$. Однако если частота ν_r отличается от ν_φ , то получаются разные результаты при изменении на единицу s или l , т. е., в общем случае, энергия зависит отдельно от s и l .

При равенстве $\nu_r = \nu_\varphi$ орбиты оказываются замкнутыми, т. е. и r , и φ возвращаются к своему начальному значению в то же самое время. Совершенно ясно, что эллиптические орбиты атома водорода обладают этим свойством. Если же радиус не возвращается к начальному значению при изменении угла на 2π , то орбиты оказываются незамкнутыми. Если различие в частотах не слишком велико, то результирующее движение может быть описано как прецессия орбиты. Прецессирующая эллиптическая орбита показана на рис. 7.

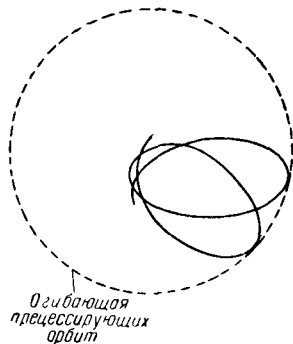


Рис. 7.

В сложном атоме в результате экранирования обычно наблюдается отклонение от закона Кулона *). В этом случае ν_r и ν_ϕ отличны друг от друга, орбиты прецессируют со скоростью, определяемой величиной разности частот, и уровни с тем же самым n и отличными l будут обладать различными энергиями. Эти изменения значений энергии для нескольких уровней показаны пунктирными линиями на диаграмме энергетических уровней (см. рис. 6). Спин электрона и релятивистские поправки также приводят к аналогичной, но, как правило, значительно более слабой зависимости энергии от l даже в случае атома водорода. Это явление называется *тонкой структурой* (см. [13], стр. 135). Если принять во внимание все эти эффекты, то можно получить хорошее согласие теории с наблюдаемым энергетическим спектром водорода, а также со спектрами щелочных металлов, например натрия.

Задача 8. Предположим, что задан потенциал $V = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{K^2}{r^2}$, ко-

торый является измененным кулоновским потенциалом. Это изменение не позволяет произвести более точный учет эффекта экранирования, но оно является хорошим приближением для учета релятивистских поправок к энергии [13]. Найти энергетические уровни как функцию радиального квантового числа l и момента количества движения и показать, что при заданном $n = l + s$ энергия оказывается независимой от значения l .

У к а з а н и е. В уравнении (2.24) следует вычислить интеграл, заменяя в нем p_ϕ^2 на $p_\phi^2 + 2mK^2$.

Первоначальная теория Бора — Зоммерфельда неполна и несколько сомнительна, несмотря на то, что она успешно объяснила энергетические уровни многих различных систем, в том числе вращающиеся и колеблющиеся молекулы, а также применима и к теории атомных спектров. Например, было совершенно неясно, как следует строго сформулировать теорию для сложных атомов для непериодических движений при процессах рассеяния электронов атомами. В некоторых случаях получались неправильные результаты для малых квантовых чисел и делались различные полуэмпирические попытки для того, чтобы добиться согласия с опытом, например, путем введения дробных квантовых чисел. Однако ошибочные выводы теории были, как правило, не слишком грубыми, поэтому было очевидно, что путь был найден правильно.

Позже мы увидим, что все эти затруднения ликвидируются в волновой механике, где можно дать, по крайней мере принципиально, полное и количественное объяснение всех явлений, в которых не играют существенной роли релятивистские эффекты. Однако волновая механика не находится в противоречии с общей линией развития

*) Часто можно аппроксимировать влияние других электронов атома на данный электрон при помощи среднего потенциала, в котором все влияние этих электронов сводится к «экранированию» рассматриваемой частицы от ядра. Такое приближение, однако, не является совершенно точным, поскольку в нем не учитываются возможности обмена энергией между внутриатомными электронами.

теории Бора — Зоммерфельда; она лишь указывает на ограничения, существующие в этой первоначальной и не совершенной теории, и на способы их преодоления.

15. Опыты Франка и Герца. Очень важным подтверждением справедливости теории Бора явились опыты Франка и Герца и ряд аналогичных экспериментов, произведенных после них (см. [13], стр. 78). До этих опытов квантовый характер энергетических переходов был ясно доказан для испускания и поглощения излучения, а также для энергетических переходов гармонических осцилляторов вещества при тепловом движении атомов твердого тела. В опытах Франка и Герца предполагалось определить, квантуется ли энергия, получаемая атомами от кинетической энергии свободных материальных частиц.

В этих опытах пучок электронов определенной энергии пропущался через разреженный газ, например через водород. (При нормальных условиях молекулы водорода находятся в состоянии с наименьшей возможной энергией.) Оказалось, что атомы газа неспособны поглощать энергию от электронного пучка до тех пор, пока энергия частиц пучка не будет равна или больше энергии, необходимой для перехода электрона в атоме с наименьшего основного энергетического состояния в ближайшее к нему возбужденное состояние, как это следует из соотношения $\Delta E = h\nu$. Начало поглощения энергии атомами обнаруживалось или по внезапному понижению тока пучка при достижении критического потенциала, или по одновременному появлению квантов, которые начинают излучаться атомами, поглотившими энергию. Каждый раз, когда достигалась критическая энергия, соответствующая известной спектральной линии, появлялся новый спад тока в пучке, сопровождаемый внезапным появлением соответствующих квантов в спектре испускания газа. Когда частицы в пучке получали энергию, достаточную для переброса электрона из основного состояния в состояние с $n = \infty$ (но не раньше), в газе начинали появляться ионы. (Этот результат также ясно показывает, что нет надежды объяснить фотоэлектрический эффект существованием в веществе электронов с энергией, близкой к порогу их освобождения.)

В последующих опытах была измерена энергия электронов после прохождения ими газа. Оказалось, что электроны, сталкивающиеся с атомами, всегда теряли точно то же количество энергии, которым обладали излучаемые при этом световые кванты, т. е. эти опыты показывают, что энергия сохраняется и в индивидуальном квантовом процессе.

Таким образом, нужно заключить, что и процессы обмена энергии между частицами вещества также ограничены некоторыми квантованными величинами, с которыми мы впервые встретились при изучении процессов обмена энергией между веществом и излучением.

Теория излучения в рамках принципа соответствия

Для изучения проблемы излучения выясним, что происходит, когда электрон переходит с одной дискретной орбиты на другую. Эта задача по существу аналогична вопросу о том, как происходит переход осциллятора излучения из одного энергетического состояния в другое. Легко видеть, что дискретность одного из этих процессов влечет за собой дискретность другого. Рассмотрим, например, процесс поглощения кванта излучения атомом, который переходит при этом из основного состояния в возбужденное. Мы видели, что в каждом индивидуальном квантовом процессе энергия сохраняется. Так как осциллятор излучения отдает свою энергию в виде одной неделимой порции, то также и атомный электрон должен принять равное количество энергии тем же дискретным способом. Следовательно, нельзя представить себе, что электрон проходит через промежуточные состояния между орбитами. Кажущееся непрерывным движение в классической физике просто отражает факт настолько близкого друг к другу расположения орбит в классическом пределе, что дискретный и скачкообразный характер этих переходов практически становится незаметным. Например, дифференцируя уравнение (2.21), мы находим, что расстояние между орбитами в водороде равно $\Delta a = 2a/l$. Относительное изменение радиуса для соседних орбит поэтому равно $\Delta a/a = 2/l$; эта величина становится очень маленькой с ростом l .

Отсутствие полной динамической определенности в процессе перехода кванта от осциллятора излучения к атому приводит и к соответствующему ее отсутствию в процессах перехода электрона с одной орбиты на следующую. Следовательно, при облучении атома светом можно предсказать лишь вероятность перехода атома в возбужденное состояние. Точно так же, если атом находится в возбужденном состоянии, то можно предсказать лишь вероятность излучения им кванта и перехода в состояние с более низкой энергией. Классические динамические законы применимы только тогда, когда система находится в таком высоком квантовом состоянии, что должно быть испущено очень много квантов, прежде чем радиус орбиты испытает заметное относительное изменение. Следовательно, при классическом описании процесса излучения электрон действительно испускает большое число квантов в сравнительно короткое время и проходит через много смежных квантовых состояний, которые настолько близки друг к другу, что процесс кажется непрерывным. При этом испускается настолько много квантов, что различие между действительным числом их и числом, предсказываемым теорией вероятностей, становится малым. Таким образом, мы получаем почти динамически определенный результат.

Задача 9. Простой гармонический осциллятор с частотой 1000 гц имеет энергию 1 эрг. Какова средняя статистическая флуктуация в числе испускаемых квантов, если осциллятор изменяет свою энергию на 1%?

16. Поглощение излучения. Рассмотрим теперь вопрос о поглощении излучения. Сначала мы вернемся к классической трактовке поглощения как непрерывного процесса, обусловленного электрическими силами, действующими на частицу. Электромагнитная волна действует на заряженную частицу с силой

$$\mathbf{F} = e \left(\mathbf{E} + \left[\frac{\mathbf{v}}{c} \mathbf{H} \right] \right). \quad (2.31)$$

Так как в вакууме $|\mathbf{E}| = |\mathbf{H}|$ и так как в большинстве атомов $v/c \ll 1$, то второй член в (2.31) обычно значительно меньше первого. Поэтому можно написать (для плоской волны)

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x}_0 - \omega t)} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)},$$

где $\mathbf{x}_0$ — положение центра атома.

В большинстве случаев $1 \gg \mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \frac{2\pi}{\lambda} |\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|$, потому что длина волны λ порядка 10^{-5} см, а $|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|$ — порядка атомных

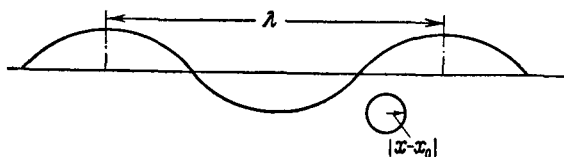


Рис. 8.

размеров, т. е. 10^{-8} см. Это показано на рис. 8. Таким образом, обычно можно записать

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x}_0 - \omega t)} = \mathbf{E}(\mathbf{x}_0) e^{-i\omega t}, \quad (2.32)$$

где $\mathbf{E}(\mathbf{x}_0)$ — значение электромагнитного поля в центре атома. Это приближение эквивалентно замене атома точечным диполем с моментом $\mathbf{M} = -e(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, локализованным в центре атома (см. гл. 18, п. 25).

Для иллюстрации вычислим скорость, с которой гармонический осциллятор с собственной частотой ω_0 , первоначально находившийся в покое в положении равновесия, получает энергию от электромагнитной волны с угловой частотой ω . Эту задачу имеет смысл рассмотреть, поскольку результаты, полученные для гармонического осциллятора, по существу таковы же, что и результаты, полученные для любой другой системы, а математические выкладки в ней гораздо проще.

Предположим, что мы имеем падающую волну, поляризованную в направлении x . Тогда, согласно уравнению (2.31), уравнение движения запишется так:

$$m(\ddot{x} + \omega_0^2 x) = eE_0 \cos(\omega t + \varphi_0), \quad (2.33)$$

где φ_0 представляет собой фазу электрического поля в точке x_0 в момент времени $t=0$. Граничные условия имеют вид $x = \dot{x} = 0$ при $t=0$, а решение, соответствующее этим условиям, равно

$$\begin{aligned} x &= \frac{e\mathcal{E}_0}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \left[\cos(\omega t + \varphi_0) - \cos(\omega_0 t + \varphi_0) + \frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} \sin \varphi_0 \sin \omega_0 t \right] = \\ &= \frac{e\mathcal{E}_0}{m(\omega_0 + \omega)} \left\{ 2 \sin(\omega_0 - \omega) \frac{t}{2} \sin \left[(\omega_0 + \omega) \frac{t}{2} + \varphi_0 \right] + \frac{\sin \varphi_0}{\omega_0} \sin \omega_0 t \right\}, \end{aligned} \quad (2.34a)$$

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{e\mathcal{E}_0}{m(\omega_0 + \omega)} \left\{ \frac{2\omega}{\omega_0 - \omega} \cos \left[(\omega_0 + \omega) \frac{t}{2} + \varphi_0 \right] \sin(\omega_0 - \omega) \frac{t}{2} + \right. \\ &\quad \left. + \sin(\omega_0 t + \varphi_0) - \sin \varphi_0 \cos \omega t \right\}. \end{aligned} \quad (2.34b)$$

Выясним теперь общий характер движения. Мы видим, что амплитуда колебаний возрастает и убывает с «частотой биений» $\nu = (\omega_0 - \omega)/4\pi$. Когда частота ω_0 далека от ω , биения очень частые, и максимальная амплитуда остается все время маленькой; но когда частота ω_0 близка к ω , то время между биениями становится очень большим, и максимальная амплитуда сильно возрастает. Физически это означает, что когда вынужденная частота далека от собственной частоты осциллятора, то внешняя сила быстро начинает расходиться по фазе с колебаниями, которые она вызывает, так что через короткое время вынуждающая сила начинает действовать против возникшего движения и поэтому уменьшает амплитуду колебаний. По мере того, как вынужденная частота ω приближается к «резонансной частоте» ω_0 , импульсы от внешнего поля начинают совпадать по фазе с колебаниями в течение все больших промежутков времени, поэтому амплитуда становится все больше, и возрастает период биений. Для определения того, что происходит при $\omega = \omega_0$, найдем предел уравнения (2.34) при $\omega \rightarrow \omega_0$. Это дает

$$x = \frac{1}{2} \frac{e\mathcal{E}_0 t}{m\omega_0} \sin(\omega_0 t + \varphi_0) + \frac{1}{2} \frac{e\mathcal{E}_0}{m\omega_0} \sin \varphi_0 \sin \omega_0 t. \quad (2.35)$$

Легко проверить непосредственным дифференцированием, что уравнение (2.35) является решением уравнения (2.33) при $\omega = \omega_0$ и что оно удовлетворяет граничным условиям*). Это — случай точного резонанса, когда амплитуда колебаний безгранично возрастает со временем, потому что вынуждающая сила никогда не расходится по фазе с колебаниями.

*) Заметим, что самое общее решение может быть получено, если к уравнению (2.35) добавить сумму $A \cos \omega_0 t + B \sin \omega_0 t$, где A и B — произвольные постоянные.

Энергия осциллятора равна

$$W = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \omega_0^2 x^2). \quad (2.36)$$

Когда частота ω близка к ω_0 , мы можем аппроксимировать значение x для достаточно больших времен, пренебрегая в правой части уравнения (2.34а) вторым членом по сравнению с первым. Аналогично можно аппроксимировать и $\dot{x}$, пренебрегая вторым и третьим членами в правой части уравнения (2.34б). В результате получим

$$W \cong \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{8m} \frac{\sin^2 (\omega_0 - \omega) t/2}{(\omega_0 - \omega)^2}. \quad (2.37)$$

Мы приходим к заключению, что поглощенная энергия пропорциональна величине $\mathcal{E}_0^2$, которая в свою очередь пропорциональна интенсивности излучения $I(x_0)$ в центре атома. Для малых промежутков времени, когда $(\omega_0 - \omega) t/2 \ll 1$, можно разложить $\sin (\omega_0 - \omega) t/2$ в ряд и найти, что энергия пропорциональна t^2 . Для больших промежутков времени энергия W проходит через максимум и возвращается к нулю, потому что вынуждающая сила перестает совпадать по фазе с колебаниями, которые она создает.

Первый из этих результатов приемлем, так как совпадает с экспериментальными данными. Последние два результата неправильны, поскольку следовало ожидать, что энергия, получаемая осциллятором, должна линейно возрасти со временем. Покажем теперь, что линейное возрастание обусловлено наличием в большинстве практических случаев не точно определенной частотой излучения, а некоторого интервала частот. Фактически существует функция интенсивности $dE = I(\nu) d\nu$, дающая энергию в интервале частот от ν до $\nu + d\nu$. Например, в случае излучения абсолютно черного тела величина $I(\nu)$ совпадает с функцией распределения Планка (см. (1.326)).

Для получения полной величины поглощаемой энергии нужно проинтегрировать уравнение (2.37) по всем частотам, учитывая, что $\mathcal{E}_0^2$ пропорциональна $I(\omega)$. Это дает

$$W \sim \int_0^\infty I(\omega) \frac{\sin^2 (\omega_0 - \omega) t/2 d\omega}{(\omega_0 - \omega)^2}. \quad (2.38)$$

Рассмотрим теперь функцию

$$F(\omega) = \frac{\sin^2 (\omega_0 - \omega) t/2}{(\omega_0 - \omega)^2}.$$

Ее максимум лежит в точке $\omega = \omega_0$ и равен $t^2/4$. Эта функция обращается в нуль при $\omega - \omega_0 = 2\pi/t$. После этого она ведет себя, как

показано на рис. 9, быстро затухая с ростом разности $\omega_0 - \omega$. Когда t велико, функция $F(\omega)$ при $\omega = \omega_0$ имеет очень острый и узкий пик (ширины $|\omega - \omega_0| \cong 2\pi/t$ и высоты $t^2/4$). Следовательно, главная часть интеграла в уравнении (2.38) получается от очень узкого интервала частот вблизи $\omega = \omega_0$. В этой области величина $I(\omega)$, которая обычно является непрерывной функцией, изменяется настолько слабо, что ее можно принять за постоянную и потому вынести за знак интеграла и положить в ней $\omega = \omega_0$. Тогда интеграл принимает вид

$$W \sim I(\omega_0) \int_0^{\infty} \frac{\sin^2(\omega - \omega_0) t/2 d\omega}{(\omega_0 - \omega)^2}. \quad (2.39)$$

Этот интеграл можно приближенно вычислить, если заметить, что для отрицательных значений ω функция $F(\omega)$ становится исчезающе

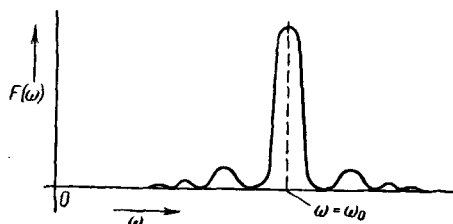


Рис. 9.

малой при больших t . Это происходит потому, что функция дает настолько острый пик при $\omega = \omega_0$, что, как видно из рис. 9, она пренебрежимо мала при $\omega = 0$, а также и для всех отрицательных ω , и ее интегралом от $-\infty$ до 0 можно пренебречь. Поэтому, допуская

лишь малую ошибку, можно распространить область интегрирования в (2.39) до $-\infty$, т. е.

$$W \sim I(\omega_0) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\omega - \omega_0) t/2 d\omega}{(\omega_0 - \omega)^2}. \quad (2.40)$$

Этот интеграл может быть вычислен при помощи подстановки

$$(\omega - \omega_0) t/2 = y \quad \text{и} \quad d\omega = (2/t) dy.$$

Это приводит к

$$W \sim I(\omega_0) \frac{t}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 y dy}{y^2} = \frac{\pi}{2} I(\omega_0) t. \quad (2.41)$$

Мы получили теперь разумный результат: поглощенная энергия пропорциональна произведению интенсивности на время облучения. Другой важный результат, получаемый из уравнения (2.40), заключается в том, что за время t основная часть поглощаемой энергии соответствует интервалу частот

$$|\omega - \omega_0| \cong \pi/t.$$

Следовательно, по мере роста времени t поглощение происходит в основном во все более узком интервале частот, вблизи резонансной частоты. Хотя каждая частота в этой области вносит в энергию свой вклад, пропорциональный t^2 , но полная поглощенная энергия пропорциональна только t , потому что интервал частот, который фактически участвует в поглощении, убывает пропорционально $1/t$. Однако если направить волну точно определенной частоты на поглотитель (например, радиоволну в резонансную полость), то энергия будет флуктуировать с частотой биения в соответствии с уравнением (2.37).

Рассмотрим теперь, как трактуется эта задача в квантовой теории, где энергетические переходы дискретны и кратны величине $h\nu$. Согласно принципу соответствия, вероятность перехода нужно выбрать таким образом, чтобы в предельных случаях, где участвует много квантов, получить классическое выражение для поглощаемой энергии в единицу времени. При этом для вероятности поглощения кванта в единицу времени следует выбрать величину

$$S = \frac{1}{h\nu} \frac{dW}{dt}, \quad (2.42)$$

где dW/dt — классически вычисленная по уравнению (2.41) скорость поглощения энергии. Так как $dW/dt \sim I$, то получаем

$$S \sim \frac{I}{h\nu}. \quad (2.43)$$

Рассмотрим теперь вопрос, будет ли эта формула, выведенная в классическом пределе, справедлива для процесса поглощения, в котором участвует лишь несколько квантов. Опыты с фотоэлектрическим эффектом показывают, что скорость поглощения кванта пропорциональна классически вычисленной интенсивности в точке поглощения. Но коэффициент пропорциональности в общем случае не будет точно совпадать с константой, полученной в уравнении (2.42), если в процессе участвует малое число квантов, хотя результаты редко приводят к большой ошибке. Точные результаты получаются в волновой механике (см. гл. 18).

Исследуем теперь, как относятся полученные результаты к двойственной корпускулярно-волновой природе частиц. Рассмотрим, например, волну, падающую на щель A (рис. 10), которая создает электрическое поле $\mathcal{E}_A(x, y, z, t)$ справа от щели. Предположим теперь, что открыта вторая щель B и что свет, проходящий через эту щель, создает поле $\mathcal{E}_B(x, y, z, t)$. Полное поле равно $\mathcal{E} = \mathcal{E}_A + \mathcal{E}_B$, а интенсивность света пропорциональна величине

$$|\mathcal{E}|^2 = |\mathcal{E}_A + \mathcal{E}_B|^2 = |\mathcal{E}_A|^2 + |\mathcal{E}_B|^2 + 2\mathcal{E}_A\mathcal{E}_B. \quad (2.44)$$

Первые два члена справа представляют собой сумму интенсивностей отдельных пучков, а третий дает эффект интерференции. Согласно уравнению (2.43), мы видим, что там, где имеют место темные

интерференционные полосы, предсказанные классическим расчетом, квантовая теория дает нулевую вероятность для поглощения кванта. Можно сделать заключение, что экстраполяция теории, полученной по принципу соответствия в классическом пределе, на случай процессов с небольшим числом квантов приводит к правильному утверждению о двойственной корпускулярно-волновой природе частиц, как

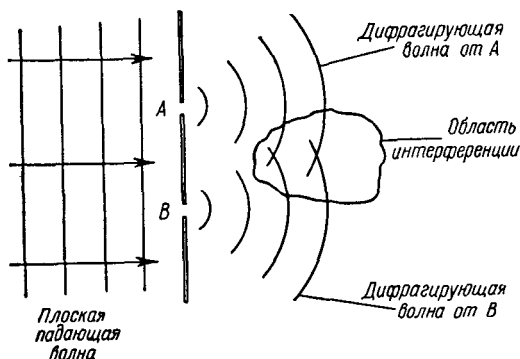


Рис. 10.

это и имеет место в действительности. Или наоборот, можно, используя непосредственные наблюдения, показать, что уравнение (2.43) в случаях с большим числом квантов приводит к правильному классическому выражению для распределения интенсивности в интерференционных полосах. Таким образом, мы опять видим, как тесно связаны квантовые законы с их классическими предельными выражениями.

17. Испускание излучения. Прежде чем вычислить вероятность испускания кванта, изучим сначала классическую теорию этого процесса. Классическая скорость излучения энергии движущейся частицей дается хорошо известной формулой (см. [13], стр. 762, уравнение (31); [11], гл. 2; [71*], т. I, гл. V)

$$\frac{dW}{dt} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} |\ddot{\mathbf{r}}|^2 = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} (\ddot{x}^2 + \ddot{y}^2 + \ddot{z}^2). \quad (2.45)$$

При вычислении входящих в (2.45) величин и их временной зависимости удобно воспользоваться разложением в ряд Фурье. На периодической орбите с основной угловой частотой ω_0 изменение каждой координаты можно представить в виде ряда Фурье. Например *),

$$x = \operatorname{Re} \sum_n X_n e^{in\omega_0 t} = \operatorname{Re} \sum_n |X_n| e^{i(n\omega_0 t + \varphi_n)} = \sum_n |X_n| \cos(n\omega_0 t + \varphi_n), \quad (2.46)$$

*) Здесь и далее символ Re означает, что берется вещественная часть от комплексного выражения. — Прим. ред.

где $X_n = |X_n| e^{i\varphi_n}$. В частности, для круговой орбиты имеем

$$x = \cos \omega_0 t, \quad y = \sin \omega_0 t,$$

так как в этом случае присутствует только одна основная частота. При движении по эллиптическим орбитам, как мы уже видели в п. 14, присутствуют также и более высокие гармоники.

Вообще говоря, движение может иметь больше чем один период. Действительно, в наиболее общем случае имеется столько периодов, сколько есть независимых степеней свободы. В такой системе, которая называется «многопериодной», мы находим, что если, например, координата x возвращается к своему первоначальному значению, то при этом координаты y и z не возвращаются к нему. Следовательно, орбиты оказываются незамкнутыми, как это было и в однопериодной системе. Как мы видели в п. 14, электрон в кулоновском поле совершает однопериодное движение. Здесь мы ограничимся рассмотрением задачи излучения только для однопериодных систем, однако метод обобщения этой задачи на случай многопериодных систем достаточно очевиден [3].

Мы вычислим здесь только излучение, создаваемое x -й слагающей ускорения, ибо эффекты y - и z -компонент движения могут быть получены совершенно таким же способом (см. (2.45)). В результате, мы получаем

$$\begin{aligned} \frac{dW_x}{dt} &= \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \omega_0^4 \left[\sum_n n^2 |X_n| \cos(n\omega_0 t + \varphi_n) \right]^2 = \\ &= \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \omega_0^4 \left\{ \left[\sum_n |X_n|^2 n^4 \cos^2(n\omega_0 t + \varphi_n) \right] + \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_{n \neq m} [|X_n| |X_m| n^2 m^2 \cos(n\omega_0 t + \varphi_n) \cos(m\omega_0 t + \varphi_m)] \right\} = \\ &= \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \omega_0^4 \left\{ \sum_n \frac{1}{2} [1 - \cos 2(n\omega_0 t + \varphi_n)] |X_n|^2 n^4 + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{n \neq m} |X_n| |X_m| n^2 m^2 [\cos((n+m)\omega_0 t + \varphi_n + \varphi_m) + \right. \\ &\quad \left. + \cos((n-m)\omega_0 t + \varphi_n - \varphi_m)] \right\}. \quad (2.47) \end{aligned}$$

Усреднение по периоду дает

$$\overline{\frac{dW_x}{dt}} = \frac{e^2}{3c^3} \omega_0^4 \sum_n n^4 |X_n|^2. \quad (2.48)$$

Мы видим, таким образом, что энергия состоит из суммы отдельных членов, по одному для каждой гармоники. Но так как радиус

электронной орбиты обычно мал по сравнению с длиной волны, то можно принять, что излучение будет таким, как если бы источником его был точечный диполь, момент которого изменяется со временем, так же как и x . Далее, можно показать, что такой диполь излучает каждую гармонику независимо от всех других. Следовательно, можно заключить, что каждый из членов ряда в уравнении (2.48) дает скорость излучения энергии $\overline{dW}_n/dt$ с частотой соответствующей гармонике $\omega_n = n\omega_0$. Таким образом, получаем

$$\nu_n = 2\pi n\omega_0, \quad (2.49)$$

$$\frac{\overline{dW}_n}{dt} = \frac{e^2 \omega_0^4}{3c^3} |X_n|^2 n^4. \quad (2.50)$$

Обратимся теперь к квантовой теории. В классическом пределе скорость испускания кванта n -й гармоники должна быть такой, чтобы можно было получить совпадение с классической скоростью излучения энергии. Это означает, что

$$R_n = \frac{\overline{dW}_n/dt}{\Delta E_n} = \frac{e^2 \omega_0^3}{6\pi \hbar c^3} |X_n|^2 n^3, \quad (2.51)$$

где

$$\Delta E_n = \hbar \nu_n = 2\pi n \hbar \omega_0.$$

Строго этот результат справедлив только в классическом пределе, когда мало относительное изменение энергии электрона, приходящееся на один испускаемый квант. Даже в случае малых квантовых чисел он редко бывает очень неправилен, поэтому его можно использовать в качестве приближенного выражения и в этой области. Как мы увидим в гл. 18, точные выражения для вероятности излучения можно найти с помощью волнового уравнения.

n -й гармонике излучения должен соответствовать квантовый переход между состояниями, у которых изменение квантового числа равно n . Для доказательства вспомним, что в классическом пределе $\Delta E \cong \nu_0 \Delta J$, где ν_0 — основная частота. Но $\Delta E = \hbar \nu = n \hbar \nu_0$, так что $\Delta J = n \hbar$. Пока рассматриваются большие квантовые числа, расстояние между уровнями не изменяется сильно при малых изменениях n . Следовательно, испускаемые частоты будут почти точно равны целому кратному числу от основной частоты. Однако лучшим приближением является следующее:

$$\hbar \nu = \Delta E = \left(\frac{\partial E}{\partial J} \right)_{J=J_0} \Delta J + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial J^2} \right)_{J=J_0} (\Delta J)^2 + \dots \quad (2.52)$$

Заменяя ΔJ через $n \hbar$, получаем

$$\nu = n \nu_0 + \frac{\hbar}{2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial J^2} \right)_{J=J_0} n^2 + \dots \quad (2.53)$$

В классическом пределе второй член очень мал по сравнению с первым. Это видно хотя бы из отношения двух последовательных членов ряда, которое равно

$$\frac{\Delta J (\partial^2 E / \partial J^2)_{J=J_0}}{2 (\partial E / \partial J)_{J=J_0}}.$$

Мы знаем, что $\partial^2 E / \partial J^2 = \partial v_0 / \partial J$. Следовательно, отношение будет равно $[\Delta J (\partial v_0 / \partial J)] / 2 v_0$. Но $\Delta J (\partial v_0 / \partial J)$ является изменением частоты, возникающим в результате изменения переменной действия ΔJ , а эта величина в классическом пределе очень мала. Следовательно, частоты гармоник относятся как целые числа. Однако когда квантовые числа становятся малыми, то расстояние между энергетическими уровнями перестает быть почти однородным, и испускаемые частоты уже не относятся друг к другу как целые числа, хотя они и связаны комбинационным принципом Ридберга — Ритца. Действительно, мы видим, что в классическом пределе принцип Ридберга — Ритца приводит точно к классическим гармоникам.

Из уравнения (2.51) можно заключить, что большие изменения квантового числа вероятны лишь тогда, когда классически вычисленное движение содержит высокие гармоники. В водороде это случай орбит с большим эксцентриситетом. Однако при переходах между круговыми орбитами присутствует только основная частота, так что квантовое число в этом случае может изменяться только на единицу.

Рассмотрим теперь, что может произойти с электроном, о котором известно, что он находится в m -м квантовом состоянии при $t=0$. Если есть другие состояния с более низкой энергией, то электрон может, испустив квант, перейти в одно из этих более низких состояний. Предположим, что вероятность перехода электрона за единицу времени в n -е состояние равна R_{mn} . (Для больших квантовых чисел R_{mn} может быть вычислено по уравнению (2.51). Заметим, что в переходе, включающем s -ю гармонику, изменение квантового числа равно $m - n = s$. Однако для малых квантовых чисел этот результат является только приближенным, для точного решения R_{mn} можно получить из волновой механики.) Полная вероятность перехода электрона за единицу времени из m -го состояния равна $R_m = \sum_n R_{mn}$, где суммирование проводится только по тем состояниям n , для которых энергия меньше, чем в состоянии m .

Пусть $P_m(t)$ — вероятность пребывания электрона в m -м состоянии. Вероятность ухода электрона из m -го состояния за интервал времени между t и $t + dt$ равняется произведению вероятности $P_m(t)$ на вероятность $R_m dt$, являющейся вероятностью того, что электрон, находящийся в данном состоянии, покинет его за время dt . Следовательно,

$$\frac{dP_m}{dt} = -R_m P_m$$

или, интегрируя и подставляя $P_m(0) = 1$, получаем

$$P_m = e^{-R_m t}. \quad (2.54)$$

Таким образом, вероятность пребывания частицы в m -м состоянии убывает экспоненциально со временем. За время $\tau = 1/R_m$ вероятность P_m уменьшается в e раз, а затем вскоре становится ничтожно малой. Таким образом, среднее время жизни атома в возбужденном состоянии будет порядка $\tau = 1/R_m$.

Если электрон находится в наинизшем энергетическом состоянии (например, в состоянии с $l = n = 1$ в атоме водорода), то дальнейшие переходы с излучением энергии невозможны, так как нет другого состояния, в которое электрон мог бы перейти, если только он не получит достаточной энергии от падающего кванта или от других источников, например от пучка быстрых частиц. Следовательно, если атом предоставлен самому себе, то он стремится достигнуть наинизшего квантового состояния, после чего с ним уже ничего не может произойти. Таким образом, квантовая теория объясняет устойчивость атомов, в то время как из классической теории следует, что электроны будут продолжать изучать до тех пор, пока они не упадут на ядро.

Задача 10. Предположим, что электрон первоначально находится в s -м квантовом состоянии и что он может совершать переходы по всей области состояний, среди которых есть m -е состояние. Полная вероятность перехода электрона за единицу времени из s -го состояния в любое более низкое состояние равна R_s , а в m -е состояние — равна R_{sm} . Полная вероятность перехода электрона из m -го состояния в любое более низкое состояние равна R_m . Вычислить $P_m(t)$ -вероятность пребывания электрона в m -м состоянии.

Задача 11. Определить энергетические уровни частицы массы m в ящике длины L . Следует рассматривать только одно измерение.

Задача 12. Определить энергетические уровни частицы в гравитационном поле с ускорением g , падающей с некоторого уровня на идеально упругий пол.

Задача 13. Каково среднее время жизни электрона в первом возбужденном состоянии атома водорода? Используйте грубый метод в рамках принципа соответствия, описанный выше. Сравните результат с точно вычисленным временем жизни при помощи квантовой механики.

Задача 14. Найдите энергетические уровни жесткого двумерного ротатора с моментом инерции I .

Выводы. Дискретность и отсутствие полной механической причинности в элементарных квантовых процессах глубоко изменили наши общие представления о природе материи и энергии. Несмотря на то, что квантовая и классическая теории весьма различны, принцип соответствия устанавливает между ними очень тесную связь. Используя ее, можно определить общий характер квантовой теории, требуя, чтобы она давала правильное приближение в классическом пределе.

ВОЛНОВЫЕ ПАКЕТЫ И ВОЛНЫ ДЕ БРОЙЛЯ

1. Введение. После появления теории атома Бора и квантовых условий Бора — Зоммерфельда де Бройль высказал предположение, что соотношение Эйнштейна $E = h\nu$, определяющее дискретный характер энергетических уровней, по-видимому, указывает на связь каждого энергетического уровня с соответствующей частотой. Однако появление дискретного ряда допустимых частот уже известно из классической физики в связи с задачей движения волн в замкнутом пространстве. Например, при выводе закона Релея — Джинса для куба мы нашли, что допустимые значения волновых векторов равны

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} (l_x, l_y, l_z),$$

что дает спектр частот

$$\omega = ck = \frac{2\pi c}{L} (l_x^2 + l_y^2 + l_z^2)^{1/2}.$$

В случае замкнутого пространства других форм получаются более сложные, но аналогичные спектры допустимых частот. Де Бройль сделал предположение, что частицы вещества как-то связаны с не обнаруженными до сих пор их волновыми свойствами. Таким образом, устанавливалось единство между веществом и светом. Оба они должны быть различными формами некоторого нового типа материального образования, которое может действовать иногда как волна, а иногда как частица.

Если вещество действительно обладает волновыми свойствами, то как можно объяснить его корпускулярные свойства, которые до открытия квантовых эффектов обнаруживались повсюду? Напомним также, что несколько веков тому назад свет считался состоящим из частиц, так как во всех известных тогда явлениях казалось, что лучи света распространяются по прямым линиям. Затем были обнаружены дифракция (вблизи границ тел) и интерференция света, которые, однако, оказались существенны только на расстояниях, сравнимых с длиной волны. Де Бройль высказал мысль, что если

волны вещества существуют, то, вероятно, их длина волны настолько мала, что до сих пор мы наблюдали движение их только в виде лучей и что более чувствительные эксперименты могут обнаружить эффекты дифракции и интерференции.

В этой главе будет изложена теория де Бройля о волнах вещества и получены так называемые «соотношения де Бройля», которые определяют длину волны через импульс и частоту через энергию. Мы покажем, что в классическом пределе эти волны движутся подобно классическим частицам, но несмотря на это, они позволяют правильно объяснить существование определенных допустимых энергетических состояний для квантовых уровней атомов. Затем будут рассмотрены непосредственные опытные доказательства существования электронных волн, полученные в экспериментах Дэвиссона — Джермера. Однако мы увидим, что эти волны нужно понимать как вероятность того, что частица может быть обнаружена в данной точке. Наконец, мы выведем дифференциальное уравнение в частных производных (уравнение Шрёдингера), определяющее распространение волн де Бройля.

2. Движение импульсов света. До изложения теории де Бройля для волн вещества полезно рассмотреть распространение световых лучей и детально исследовать связь между траекторией луча и волнами, составляющими этот луч. Это представляет не только самостоятельный интерес, но и позволяет также пояснить рассматриваемые процессы в терминах достаточно хорошо известных явлений световых волн. Кроме того, на этом примере можно проиллюстрировать необходимые математические методы.

Начнем с импульса света («цуга волн»), который можно получить, например, с помощью затвора, открываемого на ограниченное время τ . В общем случае такой импульс трехмерный: он имеет длину ct в направлении движения импульса и диаметр, зависящий от самого узкого размера отверстия, через которое должен пройти свет, а также и от расходимости пучка лучей после прохождения этого отверстия. Если размеры импульса велики по сравнению с длиной волны, но малы по сравнению с размерами аппаратуры, то световой пучок действует как частица (или группа частиц), локализованная в объеме цуга волн и движущаяся со скоростью света.

Рассмотрим сначала случай, когда параллельный пучок света нормально падает на затвор, который остается открытым такое короткое время, что ct намного меньше, чем диаметр импульса. Это по существу одномерный случай, так как в направлениях, перпендикулярных движению импульса, ничего существенного не происходит. Импульс просто распространяется со скоростью c в первоначальном направлении движения, которое мы принимаем за направление x .

Обычная плоская волна определенной длины волны λ размазана по всему пространству и потому не может быть использована для

описания движения импульса, который локализован в сравнительно узкой области. Чтобы получить волну, которая ограничена определенной областью пространства, мы должны построить так называемый *волновой пакет*. Волновой пакет содержит группу волн с несколько различными длинами волн, фазы и амплитуды которых выбраны таким образом, что при интерференции волны усиливают друг друга только в очень небольшой области пространства, вне которой результирующая амплитуда их быстро падает к нулю из-за интерференции. Амплитуда $\mathcal{E}$ одномерного волнового пакета (представляемая, например, Z -компонентой электрического поля) будет в общем случае изображаться кривой, показанной на рис. 11. Можно построить волновой пакет, взяв плоскую волну и проинтегрировав ее по малой области длин волн. Так, например,

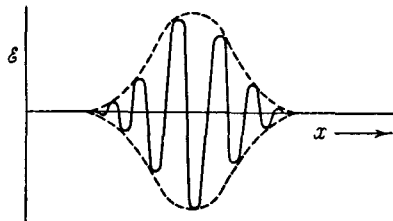


Рис. 11.

$$\mathcal{E}_Z(x) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{ik(x-x_0)} dk = 2 \frac{\sin \Delta k (x-x_0)}{(x-x_0)} e^{ik(x-x_0)}. \quad (3.1)$$

Если построить график этой функции от $(x-x_0)$, то вещественная часть $\mathcal{E}_Z(x)$ будет иметь вид, показанный на рис. 12 ($\Delta k \ll k_0$). Мы

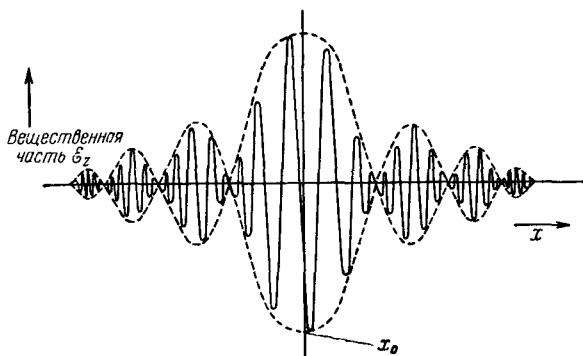


Рис. 12.

видим, что амплитуда колебаний достигает максимума в точке $x = x_0$, падает до нуля при $x - x_0 = \pi/\Delta k$, после чего превращается в быстро затухающую колеблющуюся функцию. Таким образом, мы получили

волновую функцию, сконцентрированную в пакет. В подобной функции вещественная и мнимая части быстро колеблются как функции переменной $(x - x_0)$. Интенсивность волны пропорциональна квадрату максимальной амплитуды колебания. Если, как это обычно бывает, длина волны $(\lambda = 2\pi/k_0)$ намного меньше, чем ширина пакета $\Delta x \sim \pi/\Delta k$, то этот максимум хорошо аппроксимируется квадратом абсолютного значения комплексной функции $\mathcal{E}_Z(x)$. Таким образом, получаем

$$I \sim |\mathcal{E}_Z|^2 = \frac{4 \sin^2 \Delta k (x - x_0)}{(x - x_0)^2}. \quad (3.2)$$

Для получения пакета более общего типа умножим $e^{ik(x-x_0)}$ на «весовую» функцию $f(k - k_0)$, которая велика вблизи точки $k = k_0$ и быстро затухает на очень

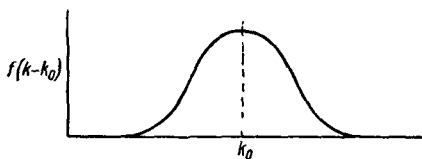


Рис. 13.

близких расстояниях Δk . Рассмотрим здесь только функции, которые не совершают быстрых колебаний внутри области Δk , тогда функцию $f(k - k_0)$ можно представить кривой, изображенной на рис. 13. Заметим, что качественно применение весовой

функции эквивалентно интегрированию по малой области длин волн. (Влияние выбора f в виде быстро колеблющейся функции будет исследовано ниже.) Далее, можно показать, что волновая функция в виде

$$\psi = \int_{-\infty}^{\infty} f(k - k_0) e^{ik(x-x_0)} dk \quad (3.3)$$

концентрируется в пакет. Для доказательства этого заметим, что при $x = x_0$ аргумент экспоненциальной функции равен нулю для всех k , следовательно, в интеграле вклады от различных значений k совпадают по фазе и в сумме дают большую величину. По мере роста разности $(x - x_0)$ множитель $e^{ik(x-x_0)}$ становится быстро колеблющейся функцией и интеграл от нее стремится к нулю, т. е. ψ -функция велика только вблизи $x = x_0$. В точках, удаленных от $x = x_0$, вклады в интеграл от различных значений k гасят друг друга из-за интерференции. Следовательно, любая функция, определяемая таким образом, имеет форму волнового пакета.

В качестве примера выберем функцию $f(k)$ в виде $\exp\left[-\frac{(k - k_0)^2}{2(\Delta k)^2}\right]$. Этот выбор обусловлен тем, что он приводит к простым математи-

ческим выкладкам. В этом случае получаем

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(k-k_0)^2}{2(\Delta k)^2} + ik(x-x_0)\right] dk = \\ &= \exp\left[ik_0(x-x_0) - \frac{(x-x_0)^2}{2}(\Delta k)^2\right] \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(k-k_0)^2}{2(\Delta k)^2} + \right. \\ &\quad \left. + i(k-k_0)(x-x_0) + \frac{(x-x_0)^2(\Delta k)^2}{2}\right] dk = \\ &= \sqrt{2\pi\Delta k} \exp\left[ik_0(x-x_0) - \frac{1}{2}(x-x_0)^2(\Delta k)^2\right]. \quad (3.4)\end{aligned}$$

Заметим, что гауссовская функция в k -пространстве приводит к такой же гауссовской функции в x -пространстве. Это единственная функция, обладающая такой особой симметрией в x - и k -пространстве. Заметим также, что результирующий пакет имеет максимум при $x=x_0$ и становится исчезающе малым при больших значениях $(x-x_0)$.

3. Ширина волнового пакета. Выясним теперь, как можно определить ширину данного волнового пакета. Эта задача представляет особый интерес, потому что полученные в ней результаты используются позже в связи с выводом соотношения неопределенностей.

Начнем с рассмотренных выше двух примеров. В первом случае интенсивность была равна

$$I \sim \frac{\sin^2(x-x_0)\Delta k}{(x-x_0)^2}.$$

Эта величина становится уже достаточно малой, когда разность $(x-x_0)$ принимает значения заметно большие, чем $1/\Delta k$, или когда $(x-x_0) > 1/\Delta k$. Аналогично во втором случае интенсивность $\{I \sim \exp[-(x-x_0)^2(\Delta k)^2]\}$ начинает уменьшаться, когда $(x-x_0)^2 > 1/(\Delta k)^2$. Так как в обоих случаях величины Δk являются мерой интервала волновых чисел k , присутствующих в пакете, то мы приходим к выводу, что произведение ширины пакета в k -пространстве на его ширину в x -пространстве, порядка единицы, т. е.

$$\Delta x \Delta k \cong 1. \quad (3.5)$$

Это означает, что пакет, узкий в k -пространстве, должен быть очень широким в x -пространстве, и наоборот.

Легко показать, что этот результат справедлив для любого пакета, имеющего форму (3.3), если $f(k-k_0)$ — плавная функция, не совершающая слишком быстрых колебаний. Рассмотрим функцию (3.3),

чтобы показать это. Мы видим, что в интеграле вклады от различных значений k складываются в результате интерференции, если они удовлетворяют неравенству

$$k(x - x_0) < 1,$$

но для больших значений k соответствующие им подынтегральные выражения начинают колебаться и расходиться по фазе. Так как функция f велика только в ограниченной области Δk , то при условии $|x - x_0| > 1/\Delta k$ имеет место резкое затухание, обусловленное интерференцией. Следовательно, мы опять приходим к тому же результату $\Delta x \Delta k \cong 1$.

Полученные результаты можно сформулировать в более простом виде; для построения пакета с исчезающе малой интенсивностью вне области Δx необходимо просуммировать волны, представляемые такими функциями, как $\cos k(x - x_0)$ и $\cos(k + \Delta k)(x - x_0)$, которые находятся в фазе при $x = x_0$, но расходятся по фазе при $x = x_0 + \Delta x$, так что должно иметь место неравенство $(x - x_0)\Delta k > 1$. Заметим, однако, что этот результат требует одинакового знака складываемых волн. Если величина $f(k - k_0)$ была бы быстро колеблющейся функцией, то это неравенство не было бы всегда справедливо.

Аналогичные результаты можно получить и для связи между интервалом времени Δt , необходимым для прохождения импульса через данную точку, и интервалом угловых частот $\Delta \omega$, необходимых для образования такого импульса. Так, электрическое поле в данной точке может быть выражено в виде

$$\mathcal{E} = \int f(\omega - \omega_0) \exp[-i\omega(t - t_0)] d\omega. \quad (3.6)$$

Эта функция представляет собой импульс, который велик только вблизи $t = t_0$, и обладает шириной Δt , подчиняющейся соотношению

$$\Delta \omega \Delta t \cong 1. \quad (3.7)$$

Факт наличия интервала частот для импульса известен, например, в радиотехнике, где мы встречаемся с понятием «ширины полосы» радиопередатчика. Для передачи импульсов звуковой частоты по радио необходимо, чтобы радиоволна меняла свою частоту на величину, по порядку равную той звуковой частоте, которую требуется передать. Если приемник настроен на полосу частот шириной $\Delta \omega$, то самый короткий импульс, который может быть им принят, имеет продолжительность $\Delta t \cong 1/\Delta \omega$.

4. Групповая скорость. Разберем теперь вопрос, как волновой пакет движется в пространстве. Для этого воспользуемся тем, что для света в вакууме волна с волновым вектором k колеблется

с частотой $\omega = ck$. Таким образом, можно написать

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(k - k_0) \exp [ik(x - x_0) - \omega t] dk = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(k - k_0) \exp [ik(x - x_0 - ct)] dk. \quad (3.8)\end{aligned}$$

Заметим, что величина $\mathcal{E}$ является функцией только $(x - x_0 - ct)$. Это означает, что импульс движется со скоростью c , не изменяя своей формы; конечно, это — хорошо известный результат.

Движение волнового пакета обусловлено изменением фазы всех компонент пакета с различными длинами волн, вызванным появлением множителя e^{-ickt} . Поэтому при $t \neq 0$ отдельные волны перестают совпадать по фазе в точке $x = x_0$, а вместо этого совпадают по фазе в точке $x = x_0 + ct$. Таким образом, изменение положения волнового пакета обусловлено изменением условий усиления и ослабления интенсивности в силу интерференции.

Предположим теперь, что пакет попадает в диспергирующую среду с показателем преломления $n(\lambda)$. Угловая частота $\omega = 2\pi c/\lambda n(\lambda)$ в общем случае является сложной функцией длины волны λ , а следовательно и k . Чтобы подчеркнуть это, введем обозначение $\omega = \omega(k)$. Тогда электрическое поле будет равно

$$\mathcal{E}(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(k - k_0) \exp [ik(x - x_0) - i\omega(k)t] dk. \quad (3.9)$$

В этом случае волновой пакет также будет изменяться со временем, но теперь его изменения будут не столь просты, как в случае $\omega = ck$, поскольку функцию $\mathcal{E}$ нельзя записать просто, как $\mathcal{E}(x - x_0 - ct)$. Это означает, что не только положение центра волнового пакета, но также и форма его будут изменяться со временем. Вопросом об изменении формы мы займемся позже, пока же рассмотрим лишь движение пакета как целого. Для нахождения положения максимума пакета заметим, что, как и в вакууме, в каждый момент имеется одна точка пространства, где волны с различными k не будут гасить друг друга из-за интерференции. Это происходит там, где фаза экспоненты $\varphi = k(x - x_0) - \omega(k)t$ имеет экстремум. Вблизи этой точки находится область значений k , где все волны имеют приблизительно одну и ту же фазу и где поэтому в результате интерференции интенсивность их усиливается. Эта точка находится из уравнения $\partial \varphi / \partial k = 0$. Его решение

$$x - x_0 = t \frac{\partial \omega}{\partial k}$$

означает, что максимум волнового пакета движется в пространстве со скоростью

$$v_g = \left(\frac{\partial \omega}{\partial k} \right)_{k=k_0}. \quad (3.10)$$

Величина v_g называется *групповой скоростью*, потому что она является скоростью движения группы волн, связанных вместе в форме пакета. Скорость v_g отличается от *фазовой скорости* $v_p = \omega/k$, являющейся скоростью движения точки с постоянной фазой и с определенными ω и k . В общем случае фазовая скорость не представляет особого физического значения, например, скорость прохождения сигнала через диэлектрик определяется групповой скоростью *), поскольку она является также и скоростью переноса энергии.

Для частного случая $\omega = ck$, который справедлив в вакууме, имеем $v_g = c = v_p$. Только, если ω пропорциональна k , групповая скорость равна фазовой скорости.

5. Расплывание волновых пакетов. Мы уже видели, что в общем случае нельзя ожидать, что волновой пакет будет проходить через диэлектрик без изменения формы. Точное решение задачи по определению изменения формы пакета при каком-то конкретном виде зависимости ω от k обычно бывает очень сложным. Однако если функция $f(k - k_0)$ обладает достаточно узким пиком, то можно получить хорошее приближение, разлагая величину $\omega(k)$ в ряд по степеням разности $k - k_0$. Это обусловлено тем, что основная часть интеграла получается при интегрировании по узкому интервалу значений k порядка ширины максимума функции $f(k - k_0)$. В результате получаем

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left(\frac{\partial \omega}{\partial k} \right)_{k=k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2} \right)_{k=k_0} (k - k_0)^2 + \dots \quad (3.11)$$

Производя замену

$$\omega(k_0) = \omega_0, \quad \left(\frac{\partial \omega}{\partial k} \right)_{k=k_0} = v_g, \quad \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2} \right)_{k=k_0} = a,$$

находим вместо (3.9)

$$\begin{aligned} \mathcal{E} = \exp \{ i [k_0(x - x_0) - \omega_0 t] \} & \int_{-\infty}^{\infty} f(k - k_0) \times \\ & \times \exp \left[i(k - k_0)(x - x_0 - v_g t) - \frac{ia}{2} (k - k_0)^2 t \right] dk. \end{aligned}$$

*) Это утверждение справедливо только, если мы не очень близки к резонансу. Иначе пуг волн настолько сильно искажается, что в нем отсутствует ярко выраженный максимум, и приходится определять другую величину, называемую *скоростью сигнала* ([21], стр. 338 или стр. 299—301 перевода), которая является скоростью фронта импульса. Найдено, что скорость сигнала никогда не превышает величины c .

Вводя обозначение $k - k_0 = x$, преобразуем эту формулу к виду

$$\mathcal{E} = \exp \{i[k_0(x - x_0) - \omega_0 t]\} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \times \\ \times \exp \left[i x (x - x_0 - v_g t) - \frac{i\alpha}{2} x^2 t \right] dx. \quad (3.12)$$

Если бы $\alpha = 0$, то $\mathcal{E}$ было бы функцией только $x - x_0 - v_g t$, и цуг волн не изменял бы своей формы. Для того чтобы показать, как влияет на цуг волн величина α , рассмотрим опять частный случай, который дается уравнением (3.4)

$$f(x) = e^{-x^2/2 (\Delta k)^2},$$

В этом случае мы получаем

$$\mathcal{E} = \exp \{i[k_0(x - x_0) - \omega_0 t]\} \int_{-\infty}^{\infty} \times \\ \times \exp \left[i x (x - x_0 - v_g t) - \frac{x^2}{2} \left(i\alpha t + \frac{1}{(\Delta k)^2} \right) \right] dx. \quad (3.13)$$

Этот интеграл можно вычислить, дополняя до полного квадрата показатель экспоненты, как это имело место в более простом интеграле в уравнении (3.4)

$$\mathcal{E} = \exp \left\{ i[k_0(x - x_0) - \omega_0 t] - \frac{(x - x_0 - v_g t)^2 (\Delta k)^2}{2[1 + i\alpha t (\Delta k)^2]} \right\} \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{1 + i\alpha t (\Delta k)^2}{(\Delta k)^2} \right] \left[k - i \frac{(x - x_0 - v_g t) \Delta k}{1 + i\alpha t (\Delta k)^2} \right]^2 \right\} dk.$$

Интеграл с точностью до экспоненциального множителя равен

$$\sqrt{\frac{2\pi (\Delta k)^2}{1 + i\alpha t (\Delta k)^2}}.$$

Можно преобразовать аргумент экспоненты к более простой форме, умножая числитель и знаменатель на разность $1 - i\alpha t (\Delta k)^2$. В результате получаем

$$\mathcal{E} = \exp \{i[k_0(x - x_0) - \omega_0 t]\} \sqrt{\frac{2\pi (\Delta k)^2}{1 + i\alpha t (\Delta k)^2}} \times \\ \times \exp \left[-\frac{(\Delta k)^2}{2} \frac{(x - x_0 - v_g t)^2}{1 + t^2 (\Delta k)^4 \alpha^2} \right] \exp \left[\frac{i\alpha t}{2} \frac{(\Delta k)^4 (x - x_0 - v_g t)^2}{1 + t^2 \alpha^2 (\Delta k)^4} \right]. \quad (3.14)$$

Так как любая величина вида $e^{i\lambda}$ по модулю равна единице и так как интенсивность волны пропорциональна $|\mathcal{E}|^2$, то мы видим,

что интенсивность рассматриваемой выше волны равна

$$I \sim \exp \left[\frac{-(\Delta k)^2 (x - x_0 - v_g t)^2}{1 + \alpha^2 t^2 (\Delta k)^4} \right].$$

Это есть не что иное, как гауссовское распределение с центром в $x = x_0 + v_g t$ в соответствии с вычислением, проведенным при определении групповой скорости. Средняя ширина распределения между точками, где величина I уменьшается в e раз по сравнению со своим максимальным значением, равна

$$\delta x = \frac{1}{\Delta k} \sqrt{1 + \alpha^2 t^2 (\Delta k)^4} = \delta x_0 \sqrt{1 + \frac{\alpha^2 t^2}{(\delta x_0)^4}}. \quad (3.15)$$

Для промежутков времени настолько малых, что $\alpha^2 t^2 (\Delta k)^4 \ll 1$, имеем $\delta x = 1/\Delta k \sim \delta x_0$, где δx_0 — ширина пакета в момент времени $t = 0$. Таким образом, на основании формулы (3.15) можно сказать, что пакет начинает заметно расплываться только для времен $t > \frac{1}{\alpha (\Delta k)^2}$.

Задача 1. Рассмотреть диэлектрик, для которого

$$n = 1 + \frac{k^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \beta}.$$

Принять, что $\omega_0 = 10^{16}$, $\beta = 10^{12}$ и $k = 10^{16}$.

- Вычислить фазовую и групповую скорости при $\omega = 10^{15}$ гц.
- Определить для $\delta x_0 = 10^{-2}$ см время, необходимое для удвоения ширины пакета, и расстояние, на которое сместится пакет за это время.
- Повторить эти вычисления для случаев, когда $\omega = 10^{16}$ и 10^{14} гц.

6. Более общий критерий для определения ширины волновых пакетов. Заметим, что для волновых пакетов, рассмотренных в предыдущем пункте,

$$\Delta x \Delta k = \sqrt{1 + \alpha^2 t^2 (\Delta k)^4}.$$

Следовательно, для больших времен произведение $\Delta x \Delta k$ становится очень большим. Это означает, что совсем не обязательно, чтобы для всех волновых пакетов было справедливо соотношение (3.5). Можно легко показать, что причиной изменения поведения волнового пакета является множитель $\exp \left[-i \frac{\alpha t}{2} (k - k_0)^2 \right]$ в подынтегральном выражении. Если t велико, то этот множитель очень быстро колеблется как функция k (особенно при больших k). Эти колебания не дают возможности сделать вывод о том, что при выполнении условия $(x - x_0) \Delta k \cong 1$ волны обязательно начинают гасить друг друга из-за интерференции, как предполагалось в п. 2 для плавно меняющейся функции $f(k - k_0)$. Это объясняется тем, что изменения фазы, обусловленные в уравнении (3.12) членом, содержащим множитель

$\exp(-iatx^2/2)$, могут в некоторых областях пространства компенсировать изменения, создаваемые членом $\exp i\kappa(x - x_0 - v_g t)$, поэтому приходится переходить к гораздо большим значениям $(x - x_0)$, чем при медленно меняющейся функции $f(k - k_0)$, для получения колебаний подынтегральной величины.

В гл. 10, п. 9 будет показано, что любое отклонение $f(k - k_0)$ от вида плавной функции всегда приводит к возрастанию величины произведения $\Delta k \Delta x$. Следовательно, можно обобщить результат п. 2 и утверждать, что

$$\Delta x \Delta k \geq 1. \quad (3.16)$$

Таким образом, для любого волнового пакета минимально возможное значение произведения $\Delta x \Delta k$ будет порядка единицы, однако можно построить волновые пакеты, для которых эта величина будет произвольно большой. Поэтому совсем не обязательно строить всякое волновое образование с интервалом частот Δk таким образом, чтобы составляющие его волны гасились из-за интерференции вне интервала пространства $\Delta x \sim 1/\Delta k$. В качестве примера можно рассмотреть радиосигнал, передающий шум, который охватывает область частот $\Delta \omega$. Этот шум может иметь правильное соотношение фаз для составляющих его волн, так что создастся импульс шириной $1/\Delta t$. Но значительно правдоподобнее, что такой шум состоит из хаотического ряда значительно более слабых импульсов, которые растянуты по гораздо более длинному интервалу времени.

7. Обобщение на трехмерный случай. Полученные результаты можно распространить и на трехмерный случай. Для этого рассмотрим пакет, соответствующий интегралу

$$\begin{aligned} \mathcal{E} = \int f(k_x - k_{x_0}, k_y - k_{y_0}, k_z - k_{z_0}) \times \\ \times \exp[i(k_x x + k_y y + k_z z)] dk_x dk_y dk_z, \end{aligned} \quad (3.17)$$

где функция f велика только в узкой области, вблизи значений $k_x = k_{x_0}$ и т. д. Можно показать, что даже в вакууме имеется тенденция к расплыванию трехмерного светового волнового пакета, однако когда диаметр пакета становится намного больше, чем его длина, т. е. он приближается к одномерному пакету, то скорость расплывания стремится к нулю. В таком состоянии, когда скорость расплывания достаточно мала и ею можно пренебречь, пакеты световых волн действуют подобно частицам в трехмерном пространстве. Например, в вакууме они движутся по прямым линиям с постоянной скоростью и отражаются от зеркальных поверхностей подобно упругим свободным частицам. В диэлектрике их скорость изменяется. В диэлектрике переменной плотности, например в стекле с неоднородной плотностью или в неоднородном слое воздуха, пакеты

распространяются фактически по криволинейным траекториям или орбитам, что весьма напоминает движение частиц в силовых полях. Мы увидим позже (гл. 12, приближение ВКБ *)), что эта аналогия может быть проведена достаточно далеко.

Для явления распыливания пакета аналогия с частицей непригодна, так как частица никогда не расплывается. Однако расплывающийся пакет можно сравнить с совокупностью частиц с несколько различными скоростями, которые с течением времени постепенно расходятся друг от друга. К этой аналогии мы вернемся позже в гл. 5, п. 4.

Электронные волны

8. Движение электронных волновых пакетов. Попробуем теперь принять вместе с де Бройлем, что вещество действительно имеет волновую природу и что в макроскопических опытах мы наблюдаем именно волновые пакеты. Поскольку волновые свойства по существу являются квантовым явлением, то траекторию движения пакета можно считать классическим пределом траектории частицы. Следовательно, групповая скорость волновых пакетов должна равняться классической скорости частицы, т. е.

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{p}{m}, \quad (3.18)$$

где p — импульс частицы. Но если воспользоваться соотношением

$$\omega = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar},$$

то найдем

$$\frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}.$$

В классической механике энергия свободной частицы равна $E = p^2/2m$, поэтому

$$\frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{p}{m\hbar} \frac{\partial p}{\partial k}.$$

Приравнявая эту величину наблюдаемой классической скорости частицы, получаем

$$\frac{p}{m\hbar} \frac{\partial p}{\partial k} = \frac{p}{m},$$

$$p = \hbar k \quad \text{или} \quad p = \hbar/\lambda. \quad (3.19)$$

Это и есть соотношение де Бройля. (Заметим, что следовало бы еще добавить постоянную интегрирования, но пока просто ищется

*) Приближенный квазиклассический метод расчета движения микрочастиц в квантовой механике разрабатывался одновременно и независимо тремя авторами: Вентцелем, Крамерсом и Бриллюэном (ВКБ). — *Прим. ред.*

способ описания движения частиц при помощи волновых пакетов, мы вправе выбрать простейший случай, т. е. положить эту константу равной нулю.) Тогда групповая скорость равна

$$v_g = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m} \quad \text{и} \quad \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (3.20)$$

Мы видим, что в противоположность световым волнам для электронов и в вакууме круговая частота ω не пропорциональна волновому числу k .

Вышеизложенное не является точным воспроизведением оригинальной работы де Бройля, который в своем выводе использовал законы релятивистской механики ([13], стр. 516; [71*], т. 1, гл. X). Совпадение между релятивистской трактовкой и трактовкой в рамках принципа соответствия не случайно, а обусловлено тем, что в классическом пределе мы должны получить релятивистское описание движения волновых пакетов, которое переходит в нерелятивистское приближение при $v/c \ll 1$. Преимущество вывода, основанного непосредственно на принципе соответствия, заключается в том, что он показывает, что можно построить волновую теорию вещества, не прибегая к теории относительности. Однако вывод де Бройля имеет то преимущество, что он показывает, что соотношения $E = \hbar \nu$ и $p = \hbar/\lambda$ релятивистски инвариантны *).

9. Учет действия внешних сил. До сих пор мы рассматривали только движение свободной частицы с помощью волновых пакетов. Если присутствует внешняя сила, то импульс частицы изменяется при ее движении от точки к точке. Согласно соотношению де Бройля $\lambda = h/p$, это означает, что длина волны становится функцией координат, имеющей вид

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m[E - V(x)]}},$$

где E — полная энергия частицы, а $V(x)$ — потенциал.

В оптике подобная зависимость длины волны от координат имеет место в среде с непрерывно изменяющимся показателем преломления. В такой среде, как известно, световой луч распространяется по криволинейному пути, что можно обнаружить, например, наблюдая искажение изображения в стеклах неоднородного состава, или же появление миража в слое воздуха с температурным градиентом. Как будет показано в гл. 12, аналогично пакеты электронных волн с длинами волн, определяемыми написанным выше выражением, движутся по траекториям классической частицы (в общем случае криволинейным) с той же скоростью, которую имела бы классическая частица, если предположить, что длина волны не претерпевает заметного относительного изменения на расстояниях

*) Термин «классическая» относится всегда к некантовой теории. Но и для классической и для квантовой теории по отдельности возможно дать релятивистскую и нерелятивистскую формулировки.

порядка своей длины. Однако если последнее условие не выполняется, то вступают в действие такие характерные волновые явления, как дифракция и интерференция. Этот случай будет рассмотрен позже. Таким образом, мы приходим к выводу, что во всех явлениях, где несущественны расстояния, сравнимые с длинами волн де Бройля, применение волновых пакетов де Бройля приводит к тем же самым результатам, что и классическая механика.

10. Эффекты квантования. Принимая во внимание все эти замечания, де Бройль смог объяснить явление квантования электронных орбит в атомах. Для этого необходимо предположить, что допустимые орбиты, например в атоме водорода, соответствуют волне, распространяющейся по кругу около ядра атома. Стационарная волна, представляющая электрон в стационарном состоянии, может быть получена, только если волна непрерывно повторяет себя после каждого полного обращения вокруг ядра. Для этого нужно, чтобы на окружности укладывалось целое число волн или $2\pi r/\lambda = n$, откуда можно заключить, что $2\pi r p_\varphi = nh$ и $p_\varphi = n\hbar$ в соответствии с основным условием Бора (гл. 2, п. 14).

Задача 2. Найти разрешенные энергетические уровни для электронных волн в потенциальном ящике длиной L . (На всех стенках волновая функция должна равняться нулю *.) Сравнить полученный результат с результатом, полученным из условий Бора — Зоммерфельда (гл. 2, задача 11).

Можно показать в самом общем виде, что соотношения де Бройля всегда приводят к условиям Бора — Зоммерфельда. Для этого рассмотрим произвольное периодическое движение, которое требуется проквантовать. (Ради простоты исследуем одномерный случай.) В общем случае существуют некоторые пределы колебаний, которые мы обозначим через $q_a = a(E)$ и $q_b = b(E)$. Движение классической частицы заключено в этих пределах. Если частица должна быть описана в терминах волн де Бройля, то устойчивое состояние может получиться только из условия такого соотношения фаз отраженной от границы волны и падающей волны, что при их наложении образуется стоячая волна. Точность выполнения этого условия зависит от природы границ, но в общем случае удается определить дискретный ряд допустимых частот, а следовательно и энергий. Если внутри области существует много длин волн (что всегда имеет место в классическом пределе), то грубо можно считать, что укладывается целое число волн, бегущих от b к a и назад, с относительной ошибкой порядка $\pm 1/n$, где n — целое число длин волн. Но целое

*) Волновая функция будет равна нулю на стенках потому, что электрон не способен проникнуть внутрь стенки. Следовательно, волновая функция должна равняться нулю внутри самих стенок, и условия непрерывности требуют, чтобы она также равнялась нулю на ребрах стенок.

число волн *) как раз равно

$$2 \int_a^b \frac{dq}{\lambda(q)} = 2 \int \frac{p}{h} dq = \oint p \frac{dq}{h}.$$

Полагая, что это выражение равно целому числу, мы приходим точно к условиям Бора — Зоммерфельда. Возможность дробного числа волн соответствует тому, что точное значение квантового числа в теории Бора — Зоммерфельда несколько неопределенно. Однако, как мы увидим позже, волновая теория приводит к точному значению этого числа и, следовательно, лишена этой двусмысленности.

11. Опыт Дэвиссона — Джермера. До сих пор мы видели, что для свободной частицы волновые пакеты могут описать все виды классического движения, а для связанных частиц условия непрерывности волновой функции приводят к правильным квантовым условиям. Однако решить вопрос, действительно ли справедлива волновая теория, может только изучение новых специфически волновых эффектов, а именно дифракции и интерференции. Действительно, на предположения де Бройля обращали довольно мало внимания до тех пор, пока Дэвиссон и Джермер через несколько лет после его первой работы, изучая рассеяние электронов от металлов, не обнаружили дифракцию электронов, подобную дифракции света от решетки. Другими словами, они нашли, что пучок электронов, падающий на кристалл, отражается только под определенными углами θ . Из уравнения Брэгга — Вульфа $\lambda/a = \sin \theta$, где a — расстояние между щелями дифракционной решетки, они вычислили величину λ и получили согласие со значением, даваемым соотношением де Бройля $\lambda = h/p$. Следовательно, электроны, отражаясь от кристалла, дифрагируют точно так же, как если бы они были волнами с длиной, предсказанной де Бройлем.

Результаты этого опыта имеют фундаментальное значение, так как они демонстрируют волновые свойства вещества, которые не могут быть поняты в рамках представлений о том, что вещество состоит из элементарных частиц. Более поздние опыты показали, что и другие частицы вещества, например молекулы, также обладают дифракционными свойствами. Таким образом, напрашивается вывод, что все вещество обладает свойством, с которым мы раньше встречались только у электромагнитного поля, а именно в некоторых опытах кажется, что оно состоит из частиц, а в других опытах мы находим достаточно убедительные доказательства того, что оно проявляет себя как волны. Итак, мы приходим к выводу о замечательном

*) До сих пор вывод относился только к декартовым координатам, но он может быть непосредственно обобщен и на случай произвольных координат.

единстве двух различных ветвей физики, но ценой введения парадоксального корпускулярно-волнового дуализма.

12. Предсказание дифракции электронов теорией Бора — Зоммерфельда. Здесь уместно указать последующее объяснение Дьюэна ([5], стр. 77 или стр. 60 перевода), который показал возможность использования уже сформулированной в то время теории Бора — Зоммерфельда для предсказания наблюдаемой дифракции электронов. Рассмотрим электрон, рассеиваемый на какой-нибудь

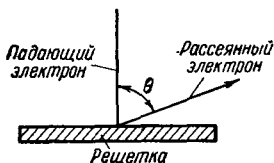


Рис. 14.

периодической структуре типа дифракционной решетки с постоянной a (рис. 14). Согласно классической теории, слагающая скорости v_x электрона вдоль решетки сохраняется до столкновения электрона с решеткой. Всякий раз, когда электрон проходит расстояние a , сила взаимодействия электрона и решетки возвращается к прежнему значению, и так как скорость постоянна, то сила будет периодической. Следовательно, можно с уверенностью сказать, что при передаче энергии решетке можно применять те же квантовые условия, как и в случае других периодических систем, например таких, как гармонический осциллятор. Поэтому величина действия J может изменяться только на величины, кратные h . При вычислении J заметим, что период равен a/J_x , следовательно, $J = \oint p dq = pa$. Квантовое условие имеет вид $a\Delta p = h$ или $\Delta p = h/a$. Но, согласно волновой теории, изменение импульса равно

$$\Delta p = p \sin \theta = \frac{h}{\lambda} \sin \theta = \frac{h}{a}.$$

Таким образом, как расчет разрешенных орбит электрона в присутствии решетки по теории Бора — Зоммерфельда, так и расчет дифракции волн от решетки с помощью волновой теории приводят к одному и тому же выражению для угла отклонения. Однако в объяснении Дьюэна появление определенных углов обусловлено квантованием передачи импульса, а в волновой теории они возникают в результате интерференции электронных волн. Этот результат показывает, что два описанных метода действительно тесно связаны.

Следует заметить, однако, что результаты Дьюэна несколько неоднозначны, так как при вычислении периода неясно, следует ли пользоваться скоростью до столкновения или после. Но в классическом пределе, когда угол отклонения мал, это несущественно. В волновой же теории такая неоднозначность отсутствует.

Так как опыт Дэвиссона — Джермера можно объяснить с помощью теории Бора — Зоммерфельда, то могло бы показаться соблаз-

нительным воздержаться от такого радикального шага, как предположение, что электроны обладают некоторыми волновыми свойствами. Однако следует помнить, что теория Бора — Зоммерфельда может иметь дело лишь с периодическими движениями, в то время как волновая теория определяет условия квантования даже для аperiodических движений. Кроме того, с логической точки зрения условия Бора — Зоммерфельда представляют собой просто произвольные ограничения на возможные движения частиц вещества, и они не способны описать, что происходит при переходах между разрешенными орбитами. Из волновой же теории естественно вытекает квантование разрешенных орбит в связи со спектром частот, полученных из граничных условий, которым должна удовлетворять волновая функция. Более того, неоднозначность, которая имеет место при малых квантовых числах в теории Бора — Зоммерфельда, отсутствует в волновой теории. Далее мы увидим, что волновая теория дает полное и количественно правильное объяснение, принципиально применимое ко всем явлениям и совпадающее с опытом для огромной совокупности явлений, для которых такое сравнение проводилось. Поэтому кажется наиболее правильным взять за основу волновую теорию, а теорию Бора — Зоммерфельда получить из нее как определенное приближение. Итак, мы пришли к выводу, что благодаря волновым свойствам и электрон, и решетка могут обмениваться лишь дискретными значениями импульса, причем эти разрешенные кванты для электрона и решетки оказываются одинаковыми, что указывает на внутреннюю согласованность всей теории в целом *).

13. Вероятностная трактовка волновой функции. Теперь необходимо попытаться получить более непосредственное физическое объяснение природы электронных волн. Эти волны вначале пытались интерпретировать как непосредственную действительную структуру электрона. Другими словами, предполагалось, что электроны подобно свету представляют собой волны, которые распространяются в пространстве, интерферируют и т. д. Однако такое объяснение вскоре наткнулось на серьезные трудности, когда было выяснено, что волновые пакеты вещества неограниченно распространяются и в течение небольшого промежутка времени способны занять очень большое пространство (до миллиардов километров). Чтобы показать это, воспользуемся уравнением (3.9), полагая в нем

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m},$$

*) Другие возражения против попыток замены волновой теорий обобщенными квантовыми условиями Бора — Зоммерфельда приводятся в гл. 6, п. 11.

как это следует из выражения (3.20). Это дает

$$\psi = \int f(k - k_0) \exp \left\{ i \left[k(x - x_0) - \frac{\hbar k^2}{2m} t \right] \right\} dk. \quad (3.21)$$

Производя замену $k - k_0 = x$, получаем

$$\begin{aligned} \psi = \exp \left\{ i \left[k_0(x - x_0) - \frac{\hbar k_0^2}{2m} t \right] \right\} \times \\ \times \int f(x) \exp \left\{ i \left[x(x - x_0) - \frac{\hbar k_0 x t}{m} - \frac{\hbar x^2 t}{2m} \right] \right\} dx. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Этот результат соответствует полученному для световых волн уравнению (3.12), если заменить в нем $\alpha = \hbar/m$ и $v_g = \hbar k_0/m$. Заметим, однако, что это выражение для световых волн является только приближенным, в то время как для электронов оно совершенно точное.

Таким образом, мы находим, что электронный волновой пакет расплывается и, используя формулу (3.15), получаем для зависимости его ширины Δx от времени следующее выражение:

$$\Delta x = \Delta x_0 \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 (\Delta x_0)^4}} \rightarrow \frac{\hbar}{m \Delta x_0} t, \text{ когда } t \rightarrow \infty, \quad (3.23)$$

где Δx_0 — ширина пакета при $t = 0$.

Задача 3. а) Предположим, что электронный волновой пакет первоначально ограничен размером 10^{-8} см. Через сколько времени ширина пакета увеличится вдвое по сравнению с первоначальными размерами? Сколько времени нужно, чтобы пакет достиг размеров солнечной системы?

б) Предположим, что волновой пакет, представляющий Землю, ограничен размером в 1 м, через сколько времени такой пакет удвоит свои первоначальные размеры?

в) Сколько нужно времени, чтобы объект массой в 1 г, с пакетом, ограниченным размером 10^{-3} см, удвоил свои размеры?

Электронный волновой пакет может расплываться очень быстро. Однако когда определяют положение электрона, то всегда обнаруживается, что он находится внутри области пространства, которую можно определить сколь угодно точно. Это и заставляет считать электрон частицей, однако другие опыты, типа опыта Дэвиссона — Джермера, приводят к выводу, что электрон — волна. Чем же он является в действительности? Точно такой же вопрос возникал при рассмотрении световых волн и фотоэлектрического эффекта (гл. 2, п. 1).

Ответ на этот вопрос мы получим позже, ознакомившись с содержанием гл. 6, 7 и 8, здесь же укажем, что, как и в случае световых волн, интенсивность электронных волн следует считать только за меру вероятности нахождения частицы в данном месте пространства. Такое представление указывает на замечательную ана-

логию свойств света и вещества, которая, однако, достигается ценой введения до некоторой степени парадоксального дуализма, требующего использования и волновой, и корпускулярной моделей для описания одной и той же системы.

Таким образом, наши представления об электронных волнах можно свести к следующим двум положениям:

1) Длина их волны определяет импульс электрона по формуле $p = h/\lambda$.

2) Интенсивность этих волн определяет вероятность нахождения электрона в данном месте пространства.

14. Сравнение электронных и электромагнитных волн. Электронные волны имеют две общие черты с электромагнитными волнами:

1) Соотношения де Бройля $E = h\nu$ и $p = h/\lambda$ справедливы для обеих.

2) И те и другие определяют только вероятность физического процесса.

Однако имеются и два существенных различия. Число квантов электромагнитного поля может изменяться вследствие процессов испускания и поглощения, а число электронов не изменяется. Следовательно, полная вероятность нахождения электрона где-либо в пространстве равняется единице и должна оставаться равной единице все время*). Подобное ограничение неприменимо к фотонам, и в следующей главе мы увидим, что оно тесно связано с видом уравнения Шрёдингера.

Другое различие заключается в том, что электромагнитные волны выражаются через векторный потенциал A . Электронные же волны первоначально рассматривались как скалярные функции. Это объясняется тем, что не было обнаружено никаких эффектов типа поляризации, которые требовали бы предположения о направленности поля. Однако позже мы увидим, что спин электрона требует введения двух волновых функций для ψ , которые преобразуются не как векторы и не как скаляры, а как промежуточный класс величин, называемый *спинорами*. Здесь мы пренебрегаем эффектами спина электрона и будем считать электронную волновую функцию скаляром.

15. Более детальная картина электронных волн. Как было показано в п. 9, наличие потенциала приводит к тому, что

) Это требование выполняется в действительности лишь в предположении, что можно пренебречь рождением и поглощением пар электрон — позитрон. Такие пары, однако, не могут возникнуть без соответствующей затраты энергии, равной $E = 2mc^2 = 1 \text{ Мэв}$, где m — масса электрона. В этой книге нас не будут интересовать процессы с такими энергиями. Типичным примером для рассматриваемых здесь явлений может служить, например, энергия ионизации атома водорода, равная всего лишь примерно 13,5 эв. О рождении пар можно узнать, например, в [22, 75].

показатель преломления непрерывно изменяется как функция точки и делает возможным криволинейное движение волны (подробнее см. гл. 15). В атоме эффективный показатель преломления изменяется так, что части волны, находящиеся на больших расстояниях от центра, движутся быстрее частей, расположенных ближе к центру, и волна из-за этого может окружать ядро. Волна имеет определенную частоту и, следовательно, определенную энергию, если она непрерывно повторяет свой путь после каждого полного оборота вокруг ядра, т. е. необходимо, чтобы при этом укладывалось целое число длин волн. Если это условие не выполняется, то волновая функция не может иметь простой формы $\psi = e^{-iEt/\hbar} f(x, y, z)$, которая предполагает наличие определенной энергии, потому что в этом случае интенсивность волны $|f(x, y, z)|^2$ должна изменяться каждый раз, когда волна совершает другой круг.

Точный вид волновой функции получается только при решении уравнения Шрёдингера, которое будет введено позже. Здесь мы лишь используем некоторые результаты этих решений, чтобы дать общее представление об электронных волнах, находящихся внутри атома (эти результаты получаются и подробно исследуются в гл. 15). В состоянии с определенной энергией волновая функция оказывается заметно отличной от нуля только в тороидальной области, окружающей ядро, с радиусом, определяемым боровской орбитой, соответствующей этому энергетическому уровню. Поперечное сечение этой области показано на рис. 15. Конечно, тороид нестрого ограничен, но

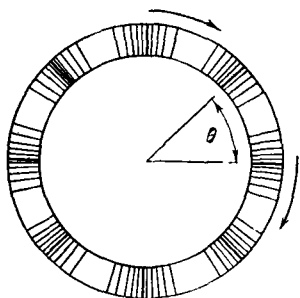


Рис. 15.

волновая функция достигает максимума в этой области и быстро убывает вне ее. Следующая боровская орбита должна выглядеть точно так же, но должна иметь больший радиус. В классическом пределе ширина тороида ничтожна по сравнению с его диаметром, т. е. получается нечто вроде классической орбиты частицы. Возможны также волны с эллиптическими орбитами.

Вещественная и мнимая части ψ распространяются вокруг ядер в виде волн с угловой частотой $\omega = E/\hbar$ и волновым вектором $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$. Вероятность нахождения частицы в данной области пропорциональна $|\psi|^2 = |f(x, y, z)|^2$.

Так как функция f более или менее однородна по величине по всему тороиду, то, по-видимому, частица будет находиться в области, предсказываемой теорией боровских орбит. Но мы не можем точно предсказать, каков при этом будет угол θ . Это аналогично случаю со свободными частицами определенной энергии, для которых

волновая функция $\psi = e^{i(kx - \omega t)}$ давала однородную вероятность для нахождения частицы в любой точке пространства. Для локализации такой частицы необходимо построить волновой пакет, содержащий интервал энергий. Аналогично, чтобы получить волновую функцию, для которой электрон в атоме с достоверностью будет находиться в довольно узкой области углов θ , также необходимо построить пакет, содержащий широкий интервал энергий. Таким образом, если частица обладает определенной энергией, то она не может быть локализована в определенной области углов; но если она локализована в ней, то ее волновая функция не может обладать определенной частотой, а должна содержать интервал частот, а следовательно и энергий. К этому вопросу мы вернемся позже при обсуждении соотношения неопределенностей.

16. Переходы между орбитами. Мы уже видели, что движение волновых пакетов описывается уравнением распространения (3.9), из которого выводилась групповая скорость. С помощью этого уравнения можно было также вычислить распывание волнового пакета. Действительно, если известно начальное значение функции $f(k - k_0)$, то это уравнение точно предсказывает, что случится с амплитудой волны со временем. Таким образом, изменение волновой функции можно назвать непрерывным и классически детерминированным.

Этот результат, полученный для случая свободной частицы, о которой до сих пор шла речь, можно перенести на случай электрона в атоме. Позже, при рассмотрении уравнения Шрёдингера это будет сделано, но мы сошлемся здесь на некоторые, будущие результаты. Пока атом не поглощает и не испускает энергии, волна продолжает распространяться вокруг ядра и имеет форму, показанную на рис. 15, где средний радиус орбиты определяется энергетическим уровнем, на котором находится электрон. Однако если электрон может получать энергию от какой-нибудь другой системы, например от электромагнитного поля, то волна постепенно стекает с первоначального тороида на другой, соответствующий более высокому энергетическому уровню (см. уравнения (4.4) и (9.49)). Пока происходит этот процесс, есть некоторая вероятность, что частица может находиться на любом тороиде. Действительно, для соседних энергетических уровней тороиды в некоторых областях перекрываются, так что волна никогда не переходит из одной области в другую, не пересекая промежуточного пространства, что является необходимым условием для непрерывности потока.

На первый взгляд кажется, что приведенное выше описание дает динамическую и непрерывную картину процесса перехода электрона из одного квантового состояния в следующее. Это находится в явном противоречии с теорией Бора — Зоммерфельда, в которой переходы между квантовыми состояниями были прерывны и

неделимы, без прохождения через промежуточные состояния, и для которых физическими законами определялась только вероятность перехода. Возникает вопрос: сумели ли мы здесь фактически освободиться от дискретности и отсутствия классического детерминизма в квантовых процессах, о которых говорилось в связи с явлениями фотоэлектрического и комптоновского эффектов? Хотя эта мысль и очень заманчива, но ответ должен быть дан отрицательный.

Рассмотрим, например, атом под действием электромагнитной волны, которая может, передавая атому энергию, заставить электронную волну перейти с внутреннего на внешний тороид. Однако экспериментально мы обнаруживаем лишь, что после очень короткого промежутка времени *весь* квант перешел к атому. Так как энергия в каждом квантовом процессе сохраняется, то электрон должен перейти в возбужденное состояние за такой же короткий промежуток времени. Между тем волна, движущаяся непрерывно, лишь в малой степени успевает за это время достигнуть наружной орбиты.

Для объяснения этого противоречия воспользуемся тем фактом, что время облучения атома светом определяет только *вероятность* передачи кванта. Мы видим, что и вероятность этого процесса и интенсивность волны во внешнем тороиде возрастают со скоростью, пропорциональной времени. По-видимому, здесь естественно применить нашу вероятностную трактовку интенсивности волны и сказать, что непрерывно возрастающая интенсивность волны во внешнем кольце соответствует непрерывно растущей вероятности передачи дискретного кванта энергии и что поэтому атом можно обнаружить в возбужденном состоянии (количественно это рассуждение проводится в гл. 18).

Необходимость дискретности процесса передачи энергии следует также из того, что допустимые частоты колебаний волновой функции, а потому и допустимые энергии дискретны. Это означает, что атом не в состоянии удержать часть кванта энергии, т. е. процесс передачи должен происходить скачком, несмотря на то, что амплитуда волны и вероятность нахождения частицы в данной точке пространства изменяются непрерывно. Следовательно, связь волновой функции с действительным и наблюдаемым явлением, как, например, перескок атома в более высокое энергетическое состояние, носит только статистический характер, поэтому здесь имеют место дискретность и отсутствие полного детерминизма*), характерные для квантовой теории. Однако, как мы увидим, волновая теория имеет громадное преимущество, так как она позволяет произвести количественный расчет энергетических уровней и вероятностей перехода.

*) См. примечание на стр. 39. — *Прим. ред.*

Волновое уравнение

Займемся теперь выводом волнового уравнения. Волновое уравнение в общем случае является дифференциальным уравнением в частных производных, удовлетворяемым волновой функцией ψ , природа которой станет ясной нам в каждом случае вывода и применения этого уравнения. В этом разделе мы рассмотрим только частный случай свободной частицы, а в части II эти результаты будут обобщены на произвольную систему.

17. Ряды и интегралы Фурье. Первым шагом при установлении волнового уравнения является изучение закона распространения волн произвольной формы. Для этого удобно воспользоваться разложением в ряд Фурье. При выводе закона Релея — Джинса оно использовалось для представления произвольной электромагнитной волны, заполняющей большую полость. Здесь желательно пользоваться волнами, ничем не ограниченными, так как мы хотим исследовать случай свободных частиц. Поэтому мы перейдем от ряда Фурье к так называемому интегралу Фурье.

Интеграл Фурье можно получить многими способами, но самый простой из них состоит в том, что берут ряд Фурье, разложенный внутри большой полости с ребром L , и стремят размеры этой полости к бесконечности. В целях большего удобства вычисления целесообразно воспользоваться комплексными функциями e^{ikx} , а не вещественными $\cos kx$ и $\sin kx$. Тогда ряд Фурье в одномерном случае можно записать в таком виде:

$$\psi(x) = \frac{(2\pi)^{1/2}}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{2\pi i n x}{L}\right) \varphi\left(\frac{2\pi n}{L}\right), \quad (3.24)$$

где φ — коэффициенты. Если ребро L становится очень большим и если φ — непрерывные функции $k = 2\pi n/L$, то изменение каждого члена ряда в результате изменения n на единицу становится очень малым. Следовательно, сумму можно заменить интегралом. Так как $\Delta n = 1$, то в сумму можно просто подставить Δn , а затем заменить на dn в интеграле. Кроме того, можно написать $dn = \frac{L}{2\pi} dk$; в результате получаем

$$\psi(x) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \varphi(k) dk. \quad (3.25)$$

Это выражение и называется интегралом Фурье. Используя прием, который был применен нами в уравнении (1.17), можно показать, что если известна функция $\psi(x)$, то можно вычислить и коэффици-

циенты $\varphi(k)$. В результате имеем

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \psi(x) dx. \quad (3.26)$$

Подставляя полученное выражение в уравнение (3.25), находим

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[ik(x-x')] \psi(x') dx' dk. \quad (3.27)$$

Это тождество называется интегральной теоремой Фурье.

Самое существенное здесь то, что при соответствующем выборе коэффициентов $\varphi(k)$ можно представить произвольную функцию *) $\psi(x)$ в неограниченной области при помощи интеграла Фурье.

18. Волна для свободной частицы. Для выяснения характера распространения какой-либо волновой функции представим себе ее разложение Фурье, так что при $t=0$ мы имеем

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} [\varphi(k)]_{t=0} e^{ikx} dk.$$

Мы уже видели, что в свободном пространстве волна с волновым вектором k должна колебаться с угловой частотой $\omega = \hbar k^2/2m$. Следовательно, значение ψ для любого момента времени получится, если умножить каждое $\varphi(k)$ на

$$\exp\left(-\frac{i\hbar k^2 t}{2m}\right),$$

откуда следует

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} [\varphi(k)]_{t=0} \exp\left[i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)\right] dk. \quad (3.28)$$

Эта формула дает нам закон изменения произвольной волновой функции с течением времени для случая свободной частицы.

19. Волновое уравнение для свободной частицы. Теперь можно получить дифференциальное уравнение в частных производных, которому должна удовлетворять функция ψ . Для этого раньше всего продифференцируем равенство (3.28) по времени. Получаем

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(k) \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \exp\left[i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)\right] dk.$$

*) Функция при этом не полностью произвольная, она должна быть кусочно-непрерывная, и интеграл по всему пространству от квадрата ее абсолютного значения должен быть конечным.

Теперь вычислим выражение $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(k) \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \exp \left[i \left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t \right) \right] dk.$$

Сравнивая написанные выше выражения, получаем следующее дифференциальное уравнение в частных производных:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (3.29)$$

Это уравнение есть следствие соотношений де Бройля и классического соотношения $E = p^2/2m$, справедливого только для свободной частицы. Чтобы перейти к более общему случаю частицы, находящейся под действием внешних сил, следует воспользоваться классическим соотношением $E = p^2/2m + V(x)$, где $V(x)$ — потенциальная энергия. Это будет сделано в части II. Выведенное так уравнение было впервые получено Шрёдингером и называется уравнением Шрёдингера. Частным случаем его является уравнение (3.29).

Практически вся волновая теория заключена в волновом уравнении, если мы знаем, как интерпретировать волновую функцию ψ . Например, одним из его следствий является сохранение энергии и импульса свободной частицы. Для показа этого заметим, что функция $\psi = \exp i(kx - \omega t)$ является решением волнового уравнения, если $\hbar\omega = \hbar^2 k^2/2m$. Но так как $E = \hbar\omega$ и $p = \hbar k$, то получаем $E = p^2/2m$ — хорошо известное классическое соотношение. Так как ни ω , ни k не меняются со временем, то отсюда следует, что E и p также остаются постоянными. Позже мы увидим, что если существует много частиц, взаимодействующих друг с другом, то волновое уравнение и в этом случае тоже будет иметь своим следствием сохранение полной и энергии импульса системы. Таким образом, этот пример показывает, что те классические динамические законы, которые непосредственно переносятся в квантовую механику, содержатся в волновом уравнении.

Волновое уравнение дает непрерывное и динамическое предсказание того, что случится с волновой функцией. Но волновая функция дает лишь вероятность нахождения электрона в данном месте. В классическом пределе наблюдение настолько грубое, что различие между вероятным и действительным поведением практически никогда не может быть обнаружено. Следовательно, волновое уравнение также определяет движение в классическом пределе. Это более непосредственно видно из следующего. Групповая скорость волнового пакета, равная $v_g = \partial\omega/\partial k$, зависит от связи между ω и k . Но, как мы видели, последняя может быть получена из рассмотрения решений волнового уравнения в виде $\exp i(kx - \omega t)$.

В более общем случае волновое уравнение определяется вероятностью любых процессов, которые могут произойти с электроном. Поэтому оно играет ту же фундаментальную роль в квантовой теории, какую в классической теории играют уравнения движения. Неудивительно, что при решении любой частной квантотеоретической задачи (например, атом водорода или гармонический осциллятор) первым шагом является отыскание правильного выражения волнового уравнения для рассматриваемой системы. В части II мы увидим, как это надо делать в общем случае.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТЕЙ

1. Введение. Пока термин «вероятность» использовался до некоторой степени неопределенным образом. Теперь перед нами встает задача получить более точное определение следующих двух вероятностей, знание которых существенно для применения теории к любым экспериментальным условиям:

1) $P(x)dx$ — вероятность нахождения частицы в области пространства между x и $x + dx$ *).

2) $P(k)dk$ — вероятность того, что импульс частицы находится в пределах от $\hbar k$ до $\hbar(k + dk)$.

Мы увидим, что возможно получить удовлетворительное определение обеих этих вероятностей и что по крайней мере в нерелятивистской области полученные определения надо рассматривать как единственно совместимые со всеми разумными требованиями, которые могут быть к ним предъявлены. Дополнительные усложнения, которые вносит релятивистская область скоростей ($v/c \sim 1$), будут также разобраны. Наконец, для кванта света будет показано, что может быть определена вероятность $P(k)$, в то время как невозможно определить вероятность $P(x)$. Это означает, что световой квант не обладает всеми пространственными свойствами частиц и что его лишь в ограниченном смысле можно относить к определенной точке пространства.

2. Выбор вида функции $P(x)$. Начнем с определения $P(x)$. Приемлемое определение этой величины должно удовлетворять по крайней мере следующим требованиям:

1) Функция $P(x)$ никогда не может быть отрицательной.

2) Вероятность велика там, где велико абсолютное значение волновой функции $|\psi|$, и мала там, где мало $|\psi|$. (Это необходимо для правильной интерпретации волновых пакетов де Бройля, чтобы они могли описать действительное движение частицы в классическом пределе. Если, например, вероятность $P(x)$ была бы велика, когда $|\psi|$

*) В нашей литературе функцию P обычно называют плотностью вероятности. В дальнейшем, как правило, она и переводится этим термином. — *Прим. ред.*

мало, то мы не имели бы права сказать, что частица находится где-то около максимума пакета.)

3) Значения $P(x)$ не должны существенно зависеть от величин, которые, как известно из общих физических соображений, не относятся к рассматриваемому вопросу. Например, в нерелятивистской теории $P(x)$ не должны зависеть от выбора нуля отсчета энергии, так как известно, что никакие существенные результаты не зависят от этого выбора. В релятивистской теории полная вероятность не должна меняться при измерениях в системах координат, движущихся с различными скоростями.

4) Так как электрон не рождается и не поглощается, то полная вероятность найти электрон где-либо в системе все время должна равняться единице. (Это требование непременно имеет место в нерелятивистской теории. Однако, как мы увидим позже в релятивистской теории, требование это должно быть несколько менее строгим, так как возможно возникновение пар электрон — позитрон, если есть световые кванты очень высокой энергии.)

Попробуем выбрать в качестве плотности вероятности следующую функцию:

$$P(x) = \psi^* \psi. \quad (4.1)$$

Очевидно, эта функция удовлетворяет требованиям (1) и (2). Она удовлетворяет и требованию (3), так как добавление произвольной постоянной E_0 к энергии изменяет частоту колебаний волновой функции на $\Delta\omega = E_0/\hbar$. Следовательно, для новой волновой функции получаем

$$\psi' = \psi \exp\left(\frac{-iE_0 t}{\hbar}\right) \quad \text{и} \quad (\psi')^* = \psi^* \exp\left(\frac{iE_0 t}{\hbar}\right),$$

т. е.

$$P'(x) = (\psi')^* \psi' = P(x).$$

Таким образом, $P(x)$ не изменяется при смещении нуля отсчета энергии.

Ниже будет показано, что $P(x)$ удовлетворяет также требованию (4), следовательно, принятое определение вероятности вполне приемлемо. Является ли это наиболее общим определением, удовлетворяющим указанным требованиям, мы увидим позже.

3. Доказательство сохранения вероятности. Покажем возможность определения $P(x)$ таким образом, что $\int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = 1$. Для этого должно выполняться следующее условие:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] dx = 0. \quad (4.2)$$

Здесь $\partial\psi/\partial t$ определяется через ψ по волновому уравнению (3.29), $\partial\psi^*/\partial t$ определяется из комплексно сопряженного уравнения

$$-i\hbar \frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}.$$

Таким образом, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = \frac{\hbar}{2mi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} - \psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \right) dx;$$

воспользуемся соотношением

$$\psi \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} - \psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi \frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} \right).$$

Тогда из написанных выше уравнений получим

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx &= -\frac{\hbar}{2mi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial x} \right) dx = \\ &= -\frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial x} \right) \Big|_{-\infty}^{\infty}. \end{aligned}$$

Если выбран ограниченный волновой пакет, то ψ^* и $\psi \rightarrow 0$, когда $x \rightarrow \pm\infty$, и потому получается сохранение величины вероятности. (Всегда известно, что рассматриваемый электрон находится где-то в ограниченной области, которая практически во всех случаях может быть определена, например принята за солнечную систему.)

4. Ток вероятности. Из выведенного выше уравнения возможно получить еще дополнительные сведения. А именно мы имеем

$$\frac{\partial P(x)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\psi^*\psi) = -\frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial x} \right).$$

Если ввести обозначение

$$S = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial x} \right), \quad (4.3)$$

то предыдущее уравнение можно записать в таком виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x) + \frac{\partial}{\partial x} S(x) = 0. \quad (4.4a)$$

Это частный случай трехмерного уравнения

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{S} = 0,$$

аналогичного уравнению непрерывности в гидродинамике $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0$, где ρ — плотность жидкости, а $\mathbf{j}$ — плотность тока. Смысл этого

уравнения заключается в том, что изменение количества вещества в элементе объема происходит за счет нескомпенсированного потока этого вещества, протекающего с плотностью $\mathbf{j}$ через границы объема. Аналогично можно рассматривать изменение вероятности как результат течения тока вероятности $\mathbf{S}$.

Легко показать, что эти определения могут быть обобщены на трехмерный случай. Волновое уравнение в этом случае принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi, \quad (4.46)$$

а вектор тока вероятности равен

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \text{grad } \psi - \psi \text{grad } \psi^*). \quad (4.5)$$

Идея, что вероятность течет через пространство более или менее подобно жидкости, физически весьма плодотворна. Например, в случае исследования перехода волны де Бройля от одного энергетического уровня к другому, мы уже предвосхитили это представление, говоря, что волна течет от одного кольца к следующему.

Задача 1. Показать, что для волновой функции $\psi = \exp \left[i \left(kx - \frac{\hbar k^2 t}{2m} \right) \right]$ ток вероятности равен $\mathbf{S} = \frac{\hbar k P(x)}{m} = v P(x)$. Таким образом, для этой волновой функции ток будет точно равен произведению скорости на плотность вероятности, как и в случае потока жидкости $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$, где ρ — плотность жидкости.

5. Является ли приведенная формулировка наиболее общей? Формулировка волновой механики, приводимая здесь, основана на трех предположениях: 1) соотношении де Бройля, подтверждаемом опытами Дэвиссона — Джермера, 2) принципе соответствия, из которого вытекает существование волновых пакетов, движущихся со скоростью классической частицы $\mathbf{p}/m$, и, наконец, 3) требовании, что можно определить плотность вероятности подходящей функцией, которая тождественно сохраняется для произвольной волновой функции, являющейся решением волнового уравнения. Посмотрим теперь, возможно ли найти другие формулировки, которые привели бы к тем же результатам? Мы увидим, что по крайней мере в нерелятивистской области все удовлетворительные формулировки должны быть по существу эквивалентны приведенной выше формулировке и что в релятивистской области возникают некоторые трудности. Мы должны разобрать здесь три вопроса:

- 1) Должна ли волновая функция быть комплексной?
- 2) Каков наиболее общий вид волнового уравнения?
- 3) Каково наиболее общее определение вероятности?

Как будет видно, эти три вопроса тесно связаны.

Если вспомнить, что световые волны можно описать при помощи вещественного вектора потенциала, то на первый взгляд кажется странным, что для электронов надо пользоваться комплексными волновыми функциями. Конечно, комплексными функциями часто пользуются как вспомогательным средством, когда имеют дело с вещественными величинами. Например, для векторного потенциала в плоской волне можно написать

$$A = \text{Re} (e^{i(kx - \omega t)}).$$

Для точного описания системы необходимо, чтобы в уравнениях, которые решаются при помощи комплексных функций, никогда не связывались вещественная и мнимая части, т. е. эти две части должны быть независимы друг от друга. Правильность этого для векторного потенциала ясно видна из того, что функция A удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = c^2 \Delta A.$$

Если написать

$$A = U + iV,$$

то получим

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = c^2 \Delta U \quad \text{и} \quad \frac{\partial^2 V}{\partial t^2} = c^2 \Delta V$$

Таким образом, слагаемые U и V остаются независимыми друг от друга, и применение комплексной функции A здесь есть просто вспомогательный прием. В общем случае так будет всегда, если мнимая единица i не входит явно в волновое уравнение.

Запишем теперь волновую функцию электрона в виде $\psi = U + iV$. Подстановка в уравнение Шрёдингера дает

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \quad \text{и} \quad \frac{\partial V}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}. \quad (4.6)$$

Здесь отдельные слагаемые U и V связаны между собой так, что ни одна из этих двух функций в отдельности не является решением уравнения Шрёдингера. Следовательно, в этом случае существенны обе функции U и V . Однако использование комплексных чисел есть просто более краткое обозначение для представления двух вещественных функций, т. е. можно сказать, что для решения уравнения Шрёдингера требуются или две вещественные функции, или их эквивалент в виде одной комплексной функции. В общем случае это будет всегда, когда волновое уравнение явно содержит мнимое число i , как это имеет место в уравнении Шрёдингера в члене $i\hbar(\partial\psi/\partial t)$.

То, что и U , и V влияют на физические результаты, можно видеть из определения вероятности $P = \psi^* \psi = U^2 + V^2$. Поучительно

получить сохранение вероятности при помощи вещественных функций U и V . В этом случае можно написать

$$\frac{\partial P(x)}{\partial t} = 2 \left(U \frac{\partial U}{\partial t} + V \frac{\partial V}{\partial t} \right).$$

Используя уравнения (4.6), исключаем $\frac{\partial U}{\partial t}$ и $\frac{\partial V}{\partial t}$ и получаем

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\hbar}{m} \left(U \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} - V \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right) = -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \left(U \frac{\partial V}{\partial x} - V \frac{\partial U}{\partial x} \right).$$

Полагая $S = \frac{\hbar}{m} \left(U \frac{\partial V}{\partial x} - V \frac{\partial U}{\partial x} \right)$, находим $\frac{\partial P(x)}{\partial t} + \frac{\partial S(x)}{\partial x} = 0$. Это выражение означает сохранение вероятности. Мы видим, что связь между U и V существенна для приведенного доказательства. Действительно, мы нашли, что ток S есть общее свойство U и V и что он исчезает, если хотя бы одна какая-либо из этих величин тождественно равна нулю.

Путем исключений из уравнения (4.6) можно получить уравнения по отдельности для функций U и V . Они имеют вид

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = -\frac{\hbar^2}{4m^2} \frac{\partial^4 U}{\partial x^4}; \quad \frac{\partial^2 V}{\partial t^2} = -\frac{\hbar^2}{4m^2} \frac{\partial^4 V}{\partial x^4}.$$

Итак, мы видим, что U и V по отдельности удовлетворяют уравнениям второго порядка по времени. Заметим, однако, что U и V еще связаны уравнением первого порядка (4.6).

Задача 2. Показать, что комплексная функция $\exp[i(kx - \omega t)]$ удовлетворяет дифференциальному уравнению первого порядка, но что наименьшим порядком линейных уравнений, которым удовлетворяют вещественная и мнимая части, является второй.

Так как U и V по отдельности удовлетворяют волновым уравнениям второго порядка, то немедленно напрашивается мысль, что можно избежать комплексных функций, заменяя уравнение Шрёдингера эквивалентным уравнением второго порядка

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\frac{\hbar^2}{4m^2} \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4}. \quad (4.7)$$

Это приводит к дисперсионному уравнению для плоских волн в виде $\omega^2 = \hbar^2 k^4 / 4m^2$, которое по существу совпадает с соотношениями де Бройля. Прежде всего покажем, что если это является правильным волновым уравнением, то все же невозможно выбирать комплексную функцию для ψ . Теперь это обусловлено тем, что вещественная и мнимая части не связаны друг с другом, т. е. U , $\partial U / \partial t$, V и $\partial V / \partial t$ могут иметь произвольные начальные значения. Однако при вычислении движения волнового пакета все известные классические виды движения уже описываются одним лишь правильным

начальным выбором функции $\psi = U + iV$. Следовательно, добавочная свобода в выборе $\partial\psi/\partial t$ приводит к новым возможным видам движения волновых пакетов, что не согласуется с правильной формой их классического предела.

Для выяснения этого вопроса во всех деталях заметим, что наше уравнение второго порядка подразумевает $\omega = \pm \hbar k^2/2m$, в то время как в случае уравнения первого порядка нужно учитывать только один знак $+$. Появление знака $+$ или $-$ указывает на большую свободу в выборе волновых функций, соответствующих уравнениям второго порядка. Построим теперь волновой пакет, как это уже делалось раньше. Так как мы можем брать любой знак у ω , то волна с волновым вектором k колеблется, как

$$\exp ikx \left[a \exp\left(-\frac{i\hbar k^2 t}{2m}\right) + b \exp\left(\frac{i\hbar k^2 t}{2m}\right) \right],$$

где a и b — произвольные постоянные. Тогда в наиболее общем случае волновая функция будет иметь вид

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(k) \exp(ikx) \left[a(k) \exp\left(-\frac{i\hbar k^2 t}{2m}\right) + b(k) \exp\left(\frac{i\hbar k^2 t}{2m}\right) \right] dk.$$

Но мы уже знаем, что правильный классический предел получается, если выбрать $b=0$ и $a=1$. Легко показать, что в случае $b \neq 0$ получаем неправильный результат для движения волновых пакетов. (Например, может получиться, что пакеты движутся одновременно в двух направлениях, хотя направление импульса определено.)

Рассмотрим теперь, возможно ли построить приемлемую теорию на основе уравнения второго порядка (4.7), пользуясь только одной вещественной волновой функцией U . Так как и U , и $\partial U/\partial t$ могут принимать произвольные начальные значения в любой точке x , то это уравнение включает в себя то же число произвольных условий, что и уравнение Шрёдингера первого порядка с комплексной функцией ψ , поэтому здесь неприменимы возражения, изложенные в предыдущем пункте. Но мы покажем, что трудность этого метода заключается в невозможности с его помощью построить требуемую функцию P .

Докажем прежде всего, что нельзя построить никакой сохраняющейся функции, определяющей плотность вероятности, которая зависела бы только от U и не зависела бы от $\partial U/\partial t$. Действительно, предположим сначала, что вероятность зависит только от U , т. е. $P = P(U)$, тогда

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} P(U) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial P}{\partial t} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial P}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial t} dx. \quad (4.8)$$

Если это выражение должно равняться нулю для произвольного U , то необходимо, чтобы $\partial U/\partial t$ определялось через U . Но это предполагает существование волнового уравнения первого порядка. Однако в дифференциальном уравнении второго порядка $\partial U/\partial t$ можно придать произвольное начальное значение, следовательно, выражение (4.8) не может равняться нулю для всех U^* .

Теперь приведем пример, в котором получается сохранение определяющей плотность вероятности функции, зависящей как от $\partial U/\partial t$, так и от пространственных производных U . Эта функция имеет вид

$$P = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{8m^2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right)^2. \quad (4.9)$$

Задача 3. Показать, что в этом случае

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} = 0,$$

где

$$S = \frac{\hbar^2}{4m^2} \left(\frac{\partial U}{\partial t} \frac{\partial^3 U}{\partial x^3} - \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial t} \right),$$

и затем доказать, что

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} P \, dx = 0.$$

Из решения этой задачи мы видим, что вероятность P сохраняется и может принимать только положительные значения. Таким образом, на первый взгляд кажется, что это идеально подходящая функция. Трудность использования ее заключается в том, что вероятность в данном случае зависит от $\omega = E/\hbar$ и, следовательно, от выбора нулевой энергии. Покажем это, вычислив P для частного случая плоской волны:

$$U = \cos(kx - \omega t).$$

Это дает

$$P = \frac{\omega^2}{2} \sin^2(kx - \omega t) + \frac{\hbar^2 k^4}{8m^2} \cos^2(kx - \omega t).$$

Если $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$, то это выражение упрощается

$$P = \frac{\omega^2}{2} = \frac{E^2}{2\hbar^2}.$$

*) Если $\partial U/\partial t$ можно придать произвольное значение, то оно само может быть равно, например, $\partial P/\partial U$. Подставляя это значение в уравнение (4.8), видим, что $\partial P/\partial t$ является интегралом от положительной величины, которая не может равняться нулю, если только $\partial P/\partial U$ не является тождественным нулем.

В нерелятивистской теории должна существовать возможность произвольного выбора нуля отсчета энергии, в результате которого получается эквивалентная теория. Мы видели, что это было возможно, например, при определении

$$P = \psi^* \psi.$$

Однако если определить P выражением (4.9), то можно получить, скажем, $P = 0$, выбирая соответствующую нулевую энергию. Следовательно, такое определение вероятности неприемлемо.

Пока просто дан частный пример того, что выбор волнового уравнения второго порядка и вещественной волновой функции не приводят к правильному определению вероятности. Можно показать, что этот вывод является общим.

Теперь покажем, что волновые уравнения выше второго порядка также недопустимы. Рассмотрим, например, уравнение четвертого порядка

$$\frac{\partial^4 \psi}{\partial t^4} = \frac{\hbar^4}{(2m)^4} \frac{\partial^8 \psi}{\partial x^8}.$$

Для плоской волны оно дает

$$\omega^4 = \left(\frac{\hbar k^2}{2m} \right)^4.$$

Таким образом, получаем четыре корня

$$\omega = \pm \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \text{и} \quad \omega = \pm i \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

Мнимые корни соответствуют недопустимым решениям, ибо они имеют вид $\exp(\pm \hbar k^2 t / 2m)$. Такие волновые функции стремятся к бесконечности, когда $|t| \rightarrow \infty$. Таким же путем можно показать, что нельзя пользоваться никаким волновым уравнением любого другого порядка для удовлетворения всех требований п. 2.

Именно поэтому мы и потребуем, чтобы в нерелятивистской теории имело место уравнение первого порядка относительно времени с комплексной волновой функцией. Можно также показать, что $P = \psi^* \psi$ является наиболее общей функцией для плотности вероятности, которая при этих условиях приводит к сохранению вероятности для произвольной функции ψ и удовлетворяет также всем другим условиям п. 2.

Задача 4. Рассмотрим для примера возможное определение

$$P = \psi^* \psi + \frac{\partial}{\partial x} (\psi^* \psi).$$

Показать, что, хотя это выражение удовлетворяет сохранению вероятности оно становится отрицательным для некоторых волновых функций и поэтому также неприемлемо. (У к а з а н и е. Положить $\psi = \cos kx$.)

Наконец, следует указать на однозначность такого выбора волнового уравнения в том смысле, что оно дает правильный предельный переход к классическому случаю и что всегда допустимы небольшие изменения в уравнении, влияние которых не будет сказываться при этом. Конечно, все это является следствием использования принципа соответствия при выводе волнового уравнения. Такие изменения придется делать, например, если мы захотим учесть спин электрона. Поэтому формулировку, данную в этом пункте, следует рассматривать в основном как правильную, но требующую в дальнейшем некоторых поправок в соответствии с результатами более точных опытов.

6. Релятивистские теории. При попытке обобщения квантовой теории на релятивистскую область возникают серьезные трудности. Отметим общий характер некоторых из них.

Первым шагом является выбор соотношения между ω и k , которое при классической связи между энергией и импульсом должно приводить к правильному описанию движения волновых пакетов в классическом пределе. Простейшее соотношение, приводящее к таким результатам, имеет вид

$$\hbar^2 \omega^2 = m^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2. \quad (4.10)$$

Оно эквивалентно классическому соотношению

$$E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2.$$

Легко показать, что соотношение (4.10) приводит в трехмерном случае к волновому уравнению

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = c^2 \Delta \psi - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \psi. \quad (4.11)$$

Задача 5. Вывести уравнение (4.11), а также показать, что соотношение (4.10) приводит к правильному классическому пределу для движения волновых пакетов.

Дальнейшей задачей является определение функции P , удовлетворяющей всем требованиям п. 2, включая и дополнительное требование, что полная вероятность инвариантна к преобразованию Лоренца. Заметим прежде всего, что в предельном случае $v/c \ll 1$ эта теория должна переходить в обычную нерелятивистскую теорию. Поскольку в последней волновая функция комплексна, то и в релятивистской теории она также должна быть такой, несмотря на второй порядок релятивистского волнового уравнения (4.11), что в свою очередь требует вещественности волновой функции. Тот факт, что для каждого k существует две частоты $\omega = \pm \sqrt{(m^2 c^4 / \hbar^2) + k^2 c^2}$, указывает на появление новой переменной. (Смысл этой новой переменной будет обсуждаться позже. Мы увидим, что она существенна

только в релятивистской области частот ($v/c \cong 1$); в нерелятивистской области всеми ее эффектами можно полностью пренебречь.)

Итак, перейдем теперь к определению функции P . Так как уравнение (4.11) второго порядка, то P должна зависеть от ψ и от $\partial\psi/\partial t$, как это показано в п. 5.

Приведем два примера функций, для которых вероятность сохраняется в силу уравнения движения:

$$P(x) = \frac{i}{2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right), \quad (4.12)$$

$$P(x) = \hbar^2 \left| \frac{\partial \psi}{\partial t} \right|^2 + \hbar^2 c^2 |\text{grad } \psi|^2 + m^2 c^4 |\psi|^2. \quad (4.13)$$

Задача 6. Доказать, что выражения (4.12) и (4.13) удовлетворяют сохранению вероятности.

Первая из этих функций не может быть использована как функция, определяющая плотность вероятности, потому что вероятность не всегда положительна. Действительно, если выбрать $\psi \sim e^{i\omega t}$, то это дает $P \sim 1$, в то время как при $\psi \sim e^{-i\omega t}$ получаем $P \sim -1$. Следовательно, здесь всегда существует возможность отрицательных значений P . Во втором случае P всегда положительна, но и этот выбор неприемлем, потому что он не приводит к релятивистски инвариантному определению полной вероятности. Чтобы показать это, рассмотрим волновую функцию в таком виде: $\psi = \exp i \left(\frac{Et - \mathbf{p}\mathbf{x}}{\hbar} \right)$. Это дает

$$P(x) = E^2 + p^2 c^2 + m^2 c^4 = 2E^2.$$

Таким образом, плотность вероятности преобразуется как квадрат энергии, которая является 4—4-компонентой 4-мерного тензора. Поэтому можно показать, что полная вероятность, преобразующаяся подобно энергии, не является инвариантной.

Задача 7. Доказать приводимые выше утверждения.

Можно показать в общем случае, что нельзя построить положительно определенную функцию, выражающую плотность вероятности, которая удовлетворяла бы уравнению второго порядка (4.11) и приводила бы к лоренцевски инвариантной полной вероятности. Предлагалось несколько путей устранения этой трудности.

1) Дирак ([4], гл. 12) построил релятивистское волновое уравнение первого порядка, вводя четыре комплексные волновые функции. Добавочные волновые функции соответствуют добавочным переменным, которые можно связать со спином и зарядом электрона. Таким путем удалось получить сохранение вероятности, а также точное описание многих релятивистских свойств электрона, которое не удалось правильно сделать никакой другой теории.

2) Паули и Вайскопф [23] решили отказаться от предположения о сохранении числа частиц. Таким образом они избавились от определения сохраняющейся функции, выражающей плотность вероятности. При этом они руководствовались для релятивистской области энергий (~ 1 Мэв или более) возможностью поглощения фотона, могущего превращаться в не существовавшую ранее пару электрон — позитрон. Для нерелятивистской области этот процесс невозможен, и поэтому вероятность сохраняется. Теория Паули — Вайскопфа переходит в теорию Шрёдингера в нерелятивистском пределе *).

Проблема построения релятивистской квантовой теории все еще встречается с серьезными трудностями [24]. Имеются убедительные доказательства, что метод Дирака является, по-видимому, очень хорошим приближением для электронов, в то время как метод Паули и Вайскопфа может быть применен к π -мезонам. Здесь не имеет смысла вникать в детали, но главный вывод, который может быть извлечен из этого пункта, заключается в том, что формулировка квантовой теории сильно зависит от природы системы, которую мы хотим описать. При построении теории необходимо, с одной стороны, соответствие ее результатов опытам и, с другой стороны, логическая непротиворечивость самой теории.

7. Плотность вероятности для кванта света. Предварительно сделаем несколько замечаний об уравнении для электромагнитной волны. Так как волновое уравнение в этом случае второго порядка, то можно заключить, что нельзя определить подходящей функции вероятности. Однако в вакууме существует по крайней мере одна положительно определенная сохраняющаяся функция, а именно плотность энергии

$$W = \frac{\mathcal{E}^2 + \mathcal{H}^2}{8\pi}.$$

Из классической электродинамики хорошо известно, что для вектора Пойнтинга $\mathbf{S} = \frac{[\mathcal{E}\mathcal{H}]}{4\pi} c$ имеем

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \text{div } \mathbf{S} = -\mathcal{E}j,$$

где j — плотность тока. Известно, что в присутствии вещества электромагнитная энергия поглощается или излучается; следовательно, нельзя ожидать сохранения электромагнитной энергии. Но в вакууме $j = 0$, и из последнего уравнения видно, что W сохраняется постоянной.

*) Новые степени свободы, соответствующие уравнению второго порядка, связаны в этой теории с возможностью появления положительных и отрицательных зарядов. Однако в нерелятивистском пределе заряд никогда не изменяется, и, следовательно, можно ограничиться одним знаком заряда. При таком ограничении получаются два отдельных уравнения первого порядка, по одному для каждого типа заряда.

Классическая теория постулирует непрерывное распределение электромагнитной энергии в пространстве. Однако, согласно квантовой теории, энергия в электромагнитном поле существует в виде дискретных квантов величиной $E = h\nu$. По принципу соответствия вероятностные квантовые законы должны быть выбраны таким образом, чтобы в классическом пределе для плотности энергии получался классический результат. Для этого нужно попытаться, так же как и в теории излучения, основанной на принципе соответствия, определить вероятность нахождения кванта в данном элементе объема $d\tau$ из соотношения

$$h\nu(x)P(x)d\tau = W(x)d\tau$$

или

$$P(x) = \frac{W(x)}{h\nu(x)} = \frac{(\mathcal{E}^2 + \mathcal{H}^2)}{8\pi hc} \lambda(x),$$

где $P(x)$ — плотность вероятности для кванта света, которая аналогична функции $\psi^*(x)\psi(x)$ для электронов *).

Однако, строго говоря, такое определение бессмысленно, потому что в данной точке длина волны не может быть даже определена. Мы можем дать лишь грубое определение понятия вероятности с помощью волнового пакета, занимающего область пространства, значительно большую, чем длина волны, потому что, как видно из уравнения (3.5),

$$\Delta x \Delta k \cong 1 \quad \text{или} \quad \frac{\Delta x \Delta \lambda}{\lambda^2} \cong 1$$

и, следовательно,

$$\frac{\Delta \lambda}{\lambda} \cong \frac{\lambda}{\Delta x}.$$

Таким образом, область длин волн, необходимая для построения волнового пакета размером $\Delta x \gg \lambda$, становится настолько малой, что данное выше определение плотности вероятности для кванта света становится несравненно более ясным.

Этот результат весьма заметно отличается от результата, полученного для электрона, где функция $P(x)$ определялась в заданной области dx независимо от поведения волновой функции вне этой области. Однако для излучения может быть определена только плотность энергии $W(x)$, и, чтобы знать вероятность нахождения кванта света в заданной области, мы должны также знать длину волны, а ее нельзя определить по значению поля внутри области dx . Таким образом, электрон имеет больше характерных свойств

*) По-видимому, разумно потребовать, чтобы вероятность, связанная с квантом в данной точке и в данный момент времени, зависела самое большее от напряженностей полей и от их пространственных и временных производных, вычисленных в данной точке и в данный момент времени.

классической частицы, чем квант света, хотя ни тот, ни другой не обладают всеми свойствами классической частицы, так как оба обнаруживают эффекты интерференции. В следующей главе, где рассматривается соотношение неопределенностей, будет показано, что в реальном процессе измерения местоположения светового кванта его невозможно локализовать внутри области Δx , которая меньше длины волны фотона.

Как же можно в таком случае объяснить в свете этих результатов опыт, в котором квант света сталкивается с атомом, диаметр которого порядка 10^{-8} см, в то время как длина волны видимого света намного больше, а именно порядка 10^{-5} см? Можно ли сказать, что квант находился внутри области намного меньшей, чем его длина волны? Ответ таков: квант света может быть локализован таким образом только в момент его исчезновения при поглощении. Следовательно, понятие частицы не может помочь объяснить результат любого другого эксперимента. Однако для электрона можно сказать, что тотчас же после того, как он был обнаружен в данном месте, другое наблюдение найдет тот же электрон в той же точке. В этом случае понятие частицы объединяет много различных экспериментальных результатов, представление же, что световой квант находится в той точке, где он поглощается, объясняет только этот единственный результат. Ниже будет показано, что всякий раз, когда квант света наблюдается без поглощения, он не может быть локализован в области, меньшей чем λ .

8. Вероятность определения значений импульса. Итак, мы получили последовательную математическую формулировку того факта, что электроны обнаруживают свойства волны и частицы, введя следующее предположение: интенсивность волн в данной точке $|\psi(x)|^2$ дает лишь вероятность обнаружить частицу в данной точке. Однако в общем случае нас могут интересовать возможности измерения и других свойств электрона, помимо его положения в пространстве; наиболее важными из них являются его импульс и энергия. В классической физике, например, знание начального положения и импульса (а следовательно, энергии) каждой частицы во вселенной, а также сил между частицами, в принципе, необходимо и достаточно для полного определения движения системы в будущем. Поскольку в квантовой теории волновое уравнение играет роль уравнения движения, то надо исследовать, в какой мере волновая функция определяет импульс электрона.

С этой целью мы воспользуемся экспериментальным фактом, что волна, имеющая длину λ , всегда связана с импульсом соотношением $p = h/\lambda$, а частота волн ν — с энергией $E = h\nu$. Но, как мы видели в гл. 3, все реальные волны имеют форму пакетов, которые включают в себя целый интервал значений частот и длин волн. Однако, как будет показано на нескольких примерах, в реальном опыте по изме-

рению импульса всегда возможно подобрать условия, при которых получается какое-то определенное значение импульса, несмотря на то, что волновой пакет содержит ряд значений импульса. Это аналогично тому, что случается при измерении положения, где также всегда находят какое-то определенное значение даже после того, как волновая функция расплывается на большую область пространства.

Здесь следует указать, что, пока речь идет о классической физике, частица есть нечто, обладающее одновременно определенным положением и определенным импульсом. Наоборот, в квантовой теории мы увидим, что, например, для электрона можно найти или определенное положение, или определенный импульс, но не оба эти свойства одновременно. В известном смысле корпускулярная природа электрона и вытекает из возможности обнаружить определенные значения или положения, или импульса. Мы увидим, что квант света тоже может обладать определенным импульсом. Однако, как было показано в п. 7, он занимает положение, которое не может быть определено точнее, чем величина длины волны. Поэтому нужно сделать заключение, что квант света обнаруживает значительно меньшее сходство с классической частицей, чем электрон, но все же иногда имеет смысл рассматривать квант как частицу вследствие его определенного импульса.

Аналогично определению функции $P(\mathbf{x}) = \psi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})$ как плотности вероятности в пространстве координат разумно предположить, что функция $P(\mathbf{k}) = \varphi^*(\mathbf{k})\varphi(\mathbf{k})$ пропорциональна плотности вероятности в $\mathbf{k}$ -пространстве, т. е. в пространстве импульсов. Правильность такого выбора будет позже доказана. Такая трактовка коэффициентов Фурье $\varphi(\mathbf{k})$ означает лишь, что в волновом пакете никогда нельзя ни предсказать, ни обнаружить точного значения импульса, а можно определить лишь вероятность данного значения $\mathbf{k}$ с помощью волновой функции. Проводя ряд опытов с одинаковыми начальными экспериментальными условиями, можно получить статистическое распределение импульсов по области и определить характер распределения векторов $\mathbf{k}$ в импульсном пространстве точно так же, как определяется статистическое распределение наблюдаемых положений, задаваемое распределением $\mathbf{x}$ в пространстве координат. Таким образом, мы обобщим корпускулярно-волновой дуализм, используя наряду с пространством координат также пространство импульсов.

Для иллюстрации приведенных выше утверждений и доказательства того, что плотность вероятности в пространстве импульсов пропорциональна функции $P(\mathbf{k}) = |\varphi(\mathbf{k})|^2$, рассмотрим опыт, в котором электромагнитная волна дифрагирует от решетки. Если падающая волна обладает определенным волновым вектором $\mathbf{k}$, то дифрагирующая волна будет отражаться от решетки лишь под определенными углами. Например, волна, которая падает на решетку нормально, отражается под углами, определяемыми выражением $\sin \theta = n\lambda/L$, где

L — расстояние между соседними полосами решетки, а n — порядок спектра. Однако если падающая волна имеет форму пакета, то каждая компонента Фурье дифрагирует независимо и отражается под углом θ , соответствующим своему волновому числу, определяемому приведенными выше формулами. Таким образом, решетка производит разложение пакета в спектр, как показано на рис. 16. В известном смысле, решетка производит разложение Фурье для пакета таким образом, что амплитуда волны $\mathcal{E}(\theta)$, отраженной под заданным углом θ , пропорциональна амплитуде соответствующего коэффициента Фурье $\mathcal{E}_k$

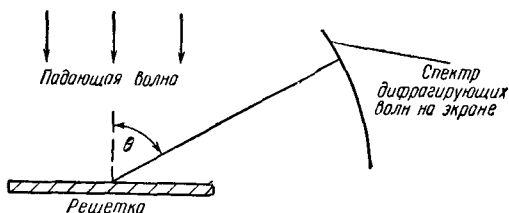


Рис. 16.

падающей волны. Аналогично интенсивность $I(\theta)$ пропорциональна $|\mathcal{E}(\theta)|^2$, а потому также и $|\mathcal{E}_k|^2$.

Рассмотрим теперь, что случится, если падающий пакет содержит только один квант. Поскольку дифрагирующая волна тоже будет содержать только один квант, то столкновение света с экраном произойдет лишь в одной точке. Вероятность отражения кванта под заданным углом θ , как мы видели по (2.43), пропорциональна $I(\theta) = |\mathcal{E}(\theta)|^2$ и, следовательно, $|\mathcal{E}_k|^2$.

Но если квант отражается под углом θ , то его волновое число равно $k = 2\pi n/L \sin \theta$, а импульс равняется $p = \hbar k = \hbar n/L \sin \theta$. Так как длина волны не изменяется при дифракции, то полный импульс также остается постоянным (хотя его направление изменяется). В результате измерение угла θ определяет импульс, который имела частица до столкновения с решеткой. Это показывает, что, хотя имеется некоторое распределение коэффициентов Фурье $\mathcal{E}_k$, в каждом отдельном опыте мы определяем только одно значение импульса в данный момент времени. Кроме того, вероятность обнаружить заданное значение импульса пропорциональна $|\mathcal{E}_k|^2$.

Хотя и существует распределение импульсов, а следовательно, и энергий, связь между энергией и импульсом для кванта света $E = pc$ остается точной и определенной. Этот важный факт следует из соотношений де Бройля, а также из соотношения $\omega = kc$, которое справедливо для электромагнитной волны в вакууме.

Аналогичный результат может быть получен и для электронов. Рассмотрим опыт Дэвиссона — Джермера, в котором пучок электро-

нов направляется на кристалл. Вследствие своих волновых свойств электроны дифрагируют так же, как световые волны. Электрон с определенным импульсом, падающий нормально на поверхность кристалла, отражается под определенным углом, который находится из выражения $\sin \theta = n\lambda/L = nh/pL$. Если волновая функция электрона представляет волновой пакет, то в результате дифракции должен появиться спектр отраженных волн, и каждая компонента Фурье будет дифрагировать независимо под своим углом. Однако любой электрон должен попадать на детектор под определенным углом, и вероятность этого равна $|\psi(\theta)|^2$, где $\psi(\theta)$ — волновая функция для данного угла. Но так же, как и в случае кванта света, можно показать, что $|\psi(\theta)|^2 \sim |\varphi(k)|^2$ и что абсолютное значение импульса не изменяется при дифракции. Таким образом, измерение угла дифракции определяет импульс частицы по дифракции, поэтому опыты по дифракции при желании могут быть использованы для измерения импульса*). Итак, можно заключить, что вероятность найти импульс электрона в интервале от $\hbar k$ до $\hbar(k + dk)$ должна быть пропорциональна $\varphi(k)^2$.

Хотя существует распределение импульсов и энергий, но, как уже отмечалось для фотонов, связь между этими двумя величинами (и в данном случае равная $E = p^2/2m$), совершенно точна. Это следует из соотношений де Бройля, а также из дисперсионного соотношения для частоты $\omega = \hbar k^2/2m$, которое можно получить из уравнения Шредингера.

9. Связь между функциями $P(x)$ и $P(k)$. Запишем теперь следующее выражение для вероятности того, что импульс находится в пределах от $\hbar k$ до $\hbar(k + dk)$:

$$P(k)dk = A|\varphi(k)|^2 dk, \quad (4.14)$$

где A — нормировочный фактор, определяемый из условия

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(k) dk = 1.$$

Отметим аналогию с

$$P(x)dx = |\psi(x)|^2 dx.$$

Функции $P(k)$ и $P(x)$ не являются независимыми друг от друга, они обе определяются одной и той же волновой функцией. Покажем эту

*) Хотя этот метод измерения импульсов несколько необычен, но он столь же законен, как и любой более привычный метод, например измерение разности потенциалов, необходимой для полного торможения частицы.

связь, представляя функцию $P(k)$ с помощью интеграла Фурье в функциях $\psi(x)$. Это дает (см. (3.26))

$$P(k) = A\varphi^*(k)\varphi(k) = \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(x-x')k] \psi^*(x')\psi(x) dx dx'. \quad (4.15)$$

Таким образом, обе функции $P(x)$ и $P(k)$ определены, если известна функция $\psi(x)$ во всех точках пространства. Поэтому, вообще говоря, этим двум функциям невозможно сопоставить произвольные ряды значений, независимые друг от друга. В связи с обсуждением соотношения неопределенностей (гл. 5) выяснится, что это является очень важным выводом теории.

Полученный результат показывает, что волновая функция $\psi(x)$ определяет *по крайней мере две* вероятности, связанные друг с другом. Позже будет показано, что функция $\psi(x)$ определяет гораздо большее число вероятностей, а именно вероятности всех возможных физических измерений. Волновую функцию часто называют «волной вероятности», но точнее было бы назвать ее «волной, с помощью которой можно вычислить много связанных друг с другом вероятностей». Специфическая сложность взаимоотношения вероятностей видна при такой записи волновой функции: $\psi = R(x)e^{i\alpha(x)}$, где $R(x)$ и $\alpha(x)$ — вещественные функции x . В этом случае вероятность $P(x)$ не зависит от $\alpha(x)$, и следовательно, только абсолютное значение ψ имеет физический смысл. Это правильно, пока мы интересуемся лишь местоположением электрона, но из уравнения (4.15) видно, что фаза волновой функции $\alpha(x)$ существенна при определении распределения импульсов. В самом деле

$$P(k) = \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{i[x-x'+\alpha(x)-\alpha(x')]\} R(x)R(x') dx dx'.$$

Следовательно, обе части волновой функции (R и α) имеют значение для определения вероятных значений результатов некоторых опытов.

10. Нормировочный фактор функции $P(k)$. Для определения нормировочного фактора A проинтегрируем уравнение (4.14) по k . Это дает

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(k) dk = \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[ik(x-x')] \psi^*(x')\psi(x) dx dx' dk.$$

Для вычисления этого интеграла прежде всего заметим, что он является при $K \rightarrow \infty$ пределом следующего интеграла:

$$\begin{aligned} \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x') \psi(x) dx dx' \int_{-K}^K \exp[ik(x-x')] dk = \\ = \frac{2A}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x') \psi(x) \frac{\sin K(x-x')}{(x-x')} dx dx'. \end{aligned}$$

Если K велико, то функция $\sin K(x-x')/(x-x')$ имеет высокий и узкий максимум с высотой K и шириной $(x-x') \cong 1/K$, вне этого пика она быстро колеблется, как функция $(x-x')$, и скоро затухает. Следовательно, весьма узкая область интегрирования вблизи точки $x-x'=0$ вносит основной вклад в интеграл. Если $\psi^*(x')$ — непрерывная функция, то она настолько мало изменяется в этой области, что ее можно вынести за знак интеграла по x' в точке $x'=x$. В результате получаем

$$\frac{2A}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin K(x-x')}{(x-x')} dx';$$

легко проверить, что остающийся интеграл по x' равен числу π . Таким образом, имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(k) dk = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx. \quad (4.16)$$

Следовательно, если функция $P(x)$ нормирована к единице, то функция $P(k)$ нормируется при этом автоматически, если принять, что $A=1$. Так как вероятность $P(x)$ остается все время нормированной, то мы заключаем, что так же ведет себя и функция $P(k)$. Это очень существенное обстоятельство для рассмотрения теории, так как оно показывает во всяком случае ее внутреннюю непротиворечивость.

Сводка основных сведений о вероятностях

Перечислим теперь все полученные выше сведения о функциях, определяющих плотность вероятности, и сравним их для случаев электронов и квантов света.

Для электронов и других частиц

1. Существует комплексная и скалярная волновая амплитуда ψ , называемая также *волновой функцией*.

Для света

1. Существует вещественная волновая амплитуда, которая является вектором, обладающим слагающимися

Она может быть выражена или как функция координат $\psi(x)$, или ее компонентой Фурье $\varphi(k)$ как функцией k .

2. С помощью этой волновой функции можно в общем случае только предсказать вероятность нахождения частицы в заданной точке пространства или вероятность заданного значения импульса частицы. В классическом пределе, когда нас интересует точность определения лишь в пределах величины волнового пакета, эта вероятность во всех практических случаях становится достоверностью, и приближенно получаются динамические классические законы для движения частицы.

3. Вероятность того, что электрон может быть найден в интервале между x и $x + dx$, равна

$$P(x) dx = \psi^*(x) \psi(x) dx.$$

4. Вероятность того, что электрон может быть найден со значением импульса в пределах от $\hbar k$ до $\hbar(k + dk)$, равна

$$P(k) dk = \varphi^*(k) \varphi(k) dk.$$

(Задача многих электронов будет рассмотрена позже.)

5. Интегралы от функций $P(x)$ и $P(k)$ остаются постоянными, как следствие волнового уравнения.

лишь нормальными к направлению распространения волны. Он может быть выражен либо функцией $\mathfrak{A}(x)$, либо ее компонентой Фурье a_k .

2. Интенсивность волны определяет только вероятность поглощения кванта энергии, когда излучаемая энергия падает на вещество. В классическом пределе, когда участвует много квантов, эта вероятность становится почти достоверностью, и приближенно получается динамическое классическое определение скорости поглощения энергии.

3. Строго говоря, не существует функции, определяющей вероятность нахождения кванта света в данной точке. Если выбрать область, большую по сравнению с длиной волны, то приближенно

$$P(x) \cong \frac{\mathcal{E}^2(x) + \mathcal{H}^2(x)}{8\pi\hbar v(x)};$$

для области, определенной более точно, величина $v(x)$ теряет смысл.

Выражение $\frac{\mathcal{E}^2 + \mathcal{H}^2}{8\pi}$ представляет собой в любом случае среднюю плотность энергии. Вероятность поглощения кванта за единицу времени атомом в точке x пропорциональна $W(x)$.

4. Для одного кванта вероятность, что его импульс находится в интервале от $\hbar k$ до $\hbar(k + dk)$, пропорциональна $\frac{1}{8\pi} (\mathcal{E}_k^2 + \mathcal{H}_k^2)$. Для многих

квантов величины $\frac{|\mathcal{E}_k|^2}{2\pi}$ пропорциональны и среднему числу квантов в области от k до $k + dk$.

5. Интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} P(k) dk$ остается постоянным только в вакууме, так как кванты света могут поглощаться или испускаться движущимися зарядами.

6. Существует ток вероятности

$$S = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \text{grad } \psi - \psi \text{grad } \psi^*),$$

удовлетворяющий соотношению

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \text{div } S = 0.$$

Следовательно можно себе представить вероятность как некую жидкость, которая непрерывно течет от одной точки пространства к другой без потерь или накоплений.

6. Для света нет соответствующей величины. Однако здесь существует поток энергии $S = \frac{c}{4\pi} [\mathcal{E} \mathcal{H}]$, который удовлетворяет соотношению

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \text{div } S = 0$$

в отсутствие токов. Это означает, что средняя энергия тоже ведет себя подобно жидкости, которая непрерывно течет от точки к точке без потерь и накоплений.

СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ *)

1. Введение. На основе изложения результатов квантовой теории, приведенных в предыдущих главах, мы можем теперь вывести очень важное соотношение, дающее количественную оценку ограничений налагаемых на детерминистическое описание мира **). Это соотношение, впервые введенное Гейзенбергом, обычно называют *соотношением неопределенностей*.

Дадим прежде всего формулировку соотношения неопределенностей: если измерение местоположения производится с точностью Δx и если *одновременно* производится измерение импульса с точностью Δp , то произведение этих двух ошибок измерений никогда не может быть меньше по порядку величины постоянной $\hbar$ ***). Другими словами,

$$\Delta p \Delta x \geq (\sim \hbar). \quad (5.1)$$

*) Автор использует другой термин — «Принцип неопределенности» (the uncertainty principle). Однако в переводе мы сочли возможным изменить его на «Соотношение неопределенностей», так как термин, принятый автором, используется при идеалистических трактовках этого объективного закона микроявлений, при которых его пытаются представить как «научное обоснование агностицизма». — *Прим. ред.*

**) Это не совсем удачное высказывание автора требует разъяснения. Дело в том, что под словом «детерминистическое» следует понимать только классическое «динамическое» объяснение явлений природы, в основе которого лежит приближенный и слишком грубый для описания микроявлений механистический принцип Лапласа. Законы микроявлений строго причинно обусловлены, и никакого индетерминизма в них нет и следа. В силу большой сложности материальных связей, с которыми мы имеем дело в атомных явлениях, закономерности их неизбежно обладают наряду с динамическими чертами также и статистическими. Однако последние являются столь же объективными, как и первые. Соотношения неопределенностей в своей менее интересной негативной части указывают нам не предел «детерминистического» описания природы, а на пределы применимости грубых макроскопических представлений для микроявлений. Более интересная позитивная сторона этих соотношений открывает перед нами новые, ранее неизвестные стороны атомных движений. — *Прим. ред.*

***) Мы будем пользоваться символом $(\sim \hbar)$ для обозначения «числа, порядка $\hbar$ ». Это связано с тем, что для величин неопределенностей существует значительная свобода в возможном выборе количественного определения. Однако эта свобода не простирается дальше, чем на множитель 10, стоящий

Так как в классической теории требуется знание начального импульса и положения каждой частицы, прежде чем могут быть определены будущие их траектории по уравнениям движения, то ясно, почему это соотношение содержит в себе квантовомеханическое ограничение при применении динамического описания микроявлений с помощью классической теории.

Аналогично можно показать *), что если энергия системы измеряется с точностью ΔE , то время, к которому это измерение относится, должно иметь минимальную неопределенность, даваемую выражением

$$\Delta E \Delta t \geq (\sim \hbar). \quad (5.2)$$

В самом общем случае можно утверждать, что если Δq — ошибка при измерении какой-либо координаты, а Δp — ошибка в определении импульса, канонически сопряженного ей, то всегда имеет место неравенство

$$\Delta p \Delta q \geq (\sim \hbar). \quad (5.3)$$

2. Вывод соотношения неопределенностей для случая электронов. Чтобы доказать соотношение неопределенностей для электронов, обратимся к уравнению (3.16), которое дает связь между интервалом координат Δx и интервалом волновых чисел Δk для волнового пакета

$$\Delta x \Delta k \geq 1. \quad (5.4)$$

Неравенство (5.4) является общим свойством волн и не ограничивается случаем квантовой теории. Однако соотношение неопределенностей вытекает из него, если принять во внимание следующую квантовомеханическую трактовку величин, входящих в неравенство (5.4):

1) Связь между волновыми числами и импульсами дается уравнением де Бройля $p = \hbar k$, что не имеет места в классической волновой теории. Например, классическая электромагнитная волна с заданным волновым числом k может обладать произвольной амплитудой, а следовательно и произвольным импульсом (см. гл. 2, п. 7).

2) Независимо от того, измеряется ли импульс или местоположение электрона, в результате всегда получается некоторое определенное число (см. гл. 3, п. 13, а также гл. 4, п. 8). В силу соотношения де Бройля, определенному импульсу соответствует определенное волновое число k . С другой стороны, в классическом

перед $\hbar$ при любом разумном способе определения неопределенности измерения.

) Следует предостеречь читателя от «аналогии» между соотношениями (5.1) и (5.2), см., например, [77], § 44 или [78*], § 108, 109. — Прим. ред.

волновом пакете мы всегда имеем дело с интервалами местоположений и волновых чисел.

3) Волновая функция $\psi(x)$ определяет только вероятность данного местоположения, а компонента Фурье $\varphi(k)$ — только вероятность данного импульса. Это означает, что невозможно предсказать или зафиксировать точное местоположение электрона внутри области Δx , в которой функция $|\psi(x)|$ достаточно велика, и что невозможно предсказать или точно измерить импульс электрона внутри интервала Δk , в котором функция $|\varphi(k)|$ достаточно велика. Таким образом, Δx является мерой минимальной неопределенности или отсутствия полного классического детерминизма в определении положения, которая может быть приписана электрону; аналогично Δk есть мера минимальной неопределенности или отсутствия полного классического детерминизма в определении импульса электрона.

Из неравенства (5.4), в силу уравнения $\Delta p = \hbar \Delta k$, вытекает соотношение неопределенностей $\Delta p \Delta x \geq \hbar$.

Аналогичным путем можно получить соотношение неопределенностей энергии — времени, исходя из выражения $\Delta \omega \Delta t \geq 1$, где Δt — интервал времени, необходимый для того, чтобы волновой пакет прошел через данную точку пространства, а $\Delta \omega$ — интервал значений угловых частот, присутствующих в этом пакете. Из соотношения де Бройля $\hbar \Delta \omega = \Delta E$ получаем $\Delta E \Delta t \geq \hbar$, где ΔE — неопределенность в определении энергии, а Δt — неопределенность определения времени, в течение которого электрон проходит через данную точку пространства.

3. О трактовке соотношений неопределенностей. При обсуждении соотношений неопределенности возникает существенный вопрос: можно ли рассматривать электрон как нечто, обладающее одновременно вполне определенными значениями координаты и импульса, которые являются неопределенными лишь потому, что их нельзя вполне точно измерить. Или же следует предположить, что отсутствие полной определенности этих величин присуще самой структуре материи? Ниже, в гл. 6, п. 11 и в гл. 22, п. 19, мы увидим, что неопределенность есть свойство самой структуры материи и что положение и импульс не могут даже существовать одновременно как вполне точно определенные величины. Поэтому термин «соотношение неопределенностей» является не вполне правильным. Точнее было бы говорить о «соотношении ограниченной динамической причинности в структуре материи». Однако для краткости мы сохраним в этой книге термин соотношение неопределенностей, которым широко пользуются в настоящее время.

Представление о том, что частица обладает одновременно вполне определенными значениями координаты и импульса, которые являются неопределенными только для нас, эквивалентно предположению о существовании скрытых параметров (см. гл. 2, п. 5), которые

в действительности определяют эти величины в любой момент времени, но таким образом, что практически мы не можем их предсказать или измерить совершенно точно. Однако ниже будет показано (см. гл. 22, п. 19), что квантовая теория несовместима с предположением о существовании скрытых параметров (см. также п. 17) *).

4. Связь явления распыливания волнового пакета с соотношением неопределенностей. Из формулы (3.23) вытекает, что волновой пакет с начальной шириной Δx_0 постепенно распыливается до ширины, которая при неограниченном возрастании времени достигает величины $\Delta x \cong \hbar t / (m \Delta x_0)$. Таким образом, чем уже был вначале волновой пакет, тем быстрее он распыливается. Теперь можно дать простое физическое объяснение этого явления, пользуясь соотношением неопределенностей. Так как размеры пакета ограничены интервалом Δx_0 , то разложение Фурье должно содержать много компонент с длинами волн порядка Δx_0 и импульсами порядка $p \cong \hbar / \Delta x_0$, поэтому интервал скоростей равен

$$\Delta v \cong \frac{p}{m} \cong \frac{\hbar}{m \Delta x_0}.$$

Хотя средняя скорость пакета равна групповой скорости, существует большая вероятность, что истинная скорость будет флуктуировать вблизи этого среднего значения в интервале $\Delta v \cong \hbar / (m \Delta x_0)$. Вследствие этой флуктуации (как по направлению, так и по величине) расстояние, проходимое частицей, не определено точно, а может изменяться в пределах

$$\Delta x \cong t \Delta v \cong \frac{\hbar t}{m \Delta x_0}.$$

Но это по порядку величины совпадает с вышеприведенной оценкой, обусловленной распыливанием волнового пакета, которое происходит в течение этого же времени. Таким образом, распыливание волнового пакета можно рассматривать как один из признаков отсутствия полного классического детерминизма в определении начальной скорости, присущего узкому волновому пакету.

5. Связь устойчивости атомов с соотношением неопределенностей. Из соотношения неопределенностей вытекает, что в среднем локализованный электрон должен иметь большой импульс и, следовательно, большую кинетическую энергию. Поэтому для локализации частицы необходима затрата энергии. Если ничто не препятствует движению электрона, то неопределенность импульса стремится разрушить с течением времени начальную локализацию частицы. Однако если электрон локализовать внешними силами, например, поместить в потенциальную яму, то упомянутый выше импульс будет создавать давление на стенки ямы, аналогично давлению,

*) См. примечание в конце гл. 8 (стр. 208). — *Прим. ред.*

создаваемому молекулами газа. Таким образом, приближенно можно считать, что постоянно локализованный электрон находится под давлением. Если это давление снять, то электрон начнет двигаться от места его начальной локализации точно так же, как молекулы газа при удалении стенок сосуда, в котором они находились.

Эта аналогия точна лишь частично, так как здесь не учитываются интерференционные явления, связанные с волновыми свойствами электрона, но она весьма полезна для описания некоторых квантовых свойств электрона. Например, этой аналогией можно воспользоваться для объяснения вопроса о том, почему электрон в атоме водорода не продолжает излучать энергию вплоть до того, пока он не упадет на ядро, как это предсказывает классическая теория. Это происходит потому, что, согласно соотношению неопределенностей, электрон обладает импульсом $p \cong \hbar/\Delta x$ и, следовательно, энергией $E = p^2/2m \cong \hbar^2/2m (\Delta x)^2$, локализующей электрон внутри области Δx . Этот импульс создает давление, которое стремится противодействовать локализации электрона. В атоме давлению противодействует сила притяжения электрона к ядру. Электрон будет находиться в состоянии равновесия, когда сила притяжения уравнивает эффективное давление. Это определяет средний радиус наинизшего квантового состояния. Состояние равновесия можно определить из условия, что полная энергия (кинетическая плюс потенциальная) должна быть минимальной*). В атоме водорода потенциальная энергия по порядку величины равна $-e^2/\Delta x$. Тогда для полной энергии будем иметь

$$W \cong \frac{\hbar^2}{2m (\Delta x)^2} - \frac{e^2}{\Delta x},$$

$$\frac{\partial W}{\partial \Delta x} \cong -\frac{\hbar^2}{m (\Delta x)^3} + \frac{e^2}{(\Delta x)^2} \cong 0,$$

$$\Delta x \cong \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Полученное значение Δx дает радиус первой боровской орбиты. Разумеется, все эти оценки носят не точный, а лишь качественный характер. Но они указывают путь для получения, в общем, правильных качественных результатов. Такая качественная трактовка очень полезна для приближенного описания свойств сложных атомов, где вычисления или очень трудны, или практически невозможны. Согласно этому представлению, электрон можно, вообще говоря, локализовать в области с радиусом меньшим, чем у первой боровской орбиты, но это требует затраты энергии и не может произойти, если электрон предоставлен самому себе и обладает энергией, соответствующей наинизшей боровской орбите. Однако если

*) В действительности необходимо дать решение для трех измерений, но легко показать, что результаты получились бы те же самые.

по какой-либо внешней причине электрон первоначально был бы локализован в ядре, то результирующая кинетическая энергия была бы настолько велика, что через короткое время электрон должен был бы совсем покинуть атом*).

Это ограничение в локализуемости электрона присуще корпускулярно-волновой природе материи. Следовательно, для того чтобы локализовать электрон в очень малом объеме пространства, надо иметь очень высокие компоненты Фурье в волновой функции электрона и, следовательно, возможность обладания очень большими значениями импульсов. Невозможно заставить электрон занять вполне определенное положение и *оставаться там в покое*.

Задача 1. а) Какая (в среднем) требуется кинетическая энергия для локализации массы в 1 г с точностью до 10^{-3} см?

б) Какая требуется энергия, чтобы локализовать Землю с точностью до 1 м?

в) Какая требуется энергия для локализации протона в пределах атомного радиуса (10^{-8} см)?

г) Какая требуется энергия, чтобы локализовать электрон в тех же пределах? Можно ли сделать какие-либо выводы из этой задачи?

Задача 2. Вычислить среднее давление, необходимое, чтобы удержать электрон внутри ядра, радиус которого равен $5 \cdot 10^{-13}$ см?

6. Теория измерений. До сих пор ограничения возможности одновременного определения положения и импульса, вытекающие из соотношения неопределенностей, являлись просто логическими выводами из предположений о волнах материи и их вероятностной трактовки. Прежде чем мы окончательно убедимся в правильности этих ограничений, необходимо построить квантовую теорию процессов измерения и показать, что эта теория приводит к тем же результатам. Другими словами, необходимо детально рассмотреть, что происходит при фактическом процессе измерения и что мешает нам делать измерения, которые позволили бы определить одновременно импульс и положение с неограниченной точностью.

При любом измерении необходимо иметь какую-то систему, которая рассматривается как измерительная аппаратура и по состоянию которой можно делать заключения о наблюдаемой системе. При этом необходимо, чтобы измерительная аппаратура взаимодействовала известным и рассчитываемым способом с наблюдаемым объектом. Например, при использовании фотокамеры для получения пространственных характеристик объекта нужно знать: как отражается от объекта свет, как он проходит через линзы, что линзы делают с ним и как изображение на фотопластинке связано с интенсивностью попадающего на нее света. Если все это известно, то по

*) Именно это обстоятельство было использовано при установлении протонно-нейтронной модели атомных ядер. — *Прим. ред.*

фотографии можно получить сведения о фотографируемом объекте. Конечно, если фотографируется мелкая пылинка, то давление излучения может изменить движение пылинки. Поэтому необходимо пользоваться слабым светом, чтобы свести такие эффекты к минимуму. Однако в любом случае при известной интенсивности света можно всегда внести поправку, если возможно вычислить давление излучения.

7. Влияние на измерение квантовых эффектов. Все вышесказанное относилось к классической теории, которая в пределах применимости является динамической теорией взаимодействия между наблюдателем и объектом и, следовательно, дает возможность сделать однозначный вывод относительно состояния измеряемого объекта. Однако в действительности это взаимодействие надо трактовать при помощи квантовой теории, в которой, как мы видели, классический детерминизм ограничен тем, что нельзя предсказать и проконтролировать передачу *отдельного* кванта. Поэтому, если желательно провести наблюдения, которые достаточно точны для определения квантовых уровней, то неизбежно войдет элемент неполного классического детерминизма во взаимодействие между аппаратурой и объектом наблюдения. Это полностью отлично от того, что предсказывается классической теорией, согласно которой возмущение, производимое измерительной аппаратурой, можно сделать произвольно малым или если даже его нельзя сделать таким, то можно рассчитать поправку на это возмущение при помощи динамических классических законов.

В связи со сказанным выше следует изучить различные устройства, применяемые при измерениях положения и импульса микрочастиц. Результаты, полученные при помощи таких устройств, обычно трактовались по законам классической механики, но теперь мы рассмотрим дальнейшие ограничения, накладываемые квантовой природой изучаемых систем. При этом ограничимся рассмотрением немногих специфических случаев, на примере которых будет показано, каким образом наличие квантовых эффектов препятствует проводить измерения с неограниченной точностью. Здесь мы лишь схематично наметим пути обобщения этих рассмотрений. Подробнее теория квантовых измерений излагается в гл. 22.

8. Микроскоп*). Одним из приборов для измерения положения электрона может служить микроскоп. Для уменьшения до минимума влияния давления излучения на электрон предположим: свет настолько слабый, что электрон рассеивает только один световой квант. (Ко-

) В связи с задачей использования оптического и электронного микроскопа как измерительного прибора, рассмотренной автором в этом разделе и далее, обращаем внимание на детальный анализ этого вопроса в лекциях Л. И. Мандельштама ([79], стр. 366 и след.) а также на учебник Д. И. Блохинцева ([78*], примечание на стр. 69). Эти авторы подчер-

нечно, электрон должен рассеять по крайней мере один квант, если мы хотим получить какие-либо сведения о нем.)

После рассеяния квант проходит через линзу и попадает в какую-то точку экрана, в качестве которого можно, например, выбрать фотопластинку (рис. 17). Из положения возникшего пятна на пластинке можно попытаться сделать вывод о положении рассеивающего электрона. Для этого воспользуемся волновой теорией света. Благодаря явлению дифракции мы знаем, что величина области, в которой свет мог испытать рассеяние, определяется формулой $\Delta x \cong \lambda / \sin \varphi$, если известно, что он сфокусирован в данной точке (φ — апертура микроскопа). Электрон мог находиться в любой точке этой области. Чтобы уменьшить эту неопределенность, можно воспользоваться малыми длинами волн λ . Но что при этом произойдет с импульсом электрона? Мы знаем, что квант обладает импульсом $p = -h/\lambda$. Если квант отклонился на угол ψ , то он передаст электрону импульс $\Delta p = p \sin \psi = h/\lambda \sin \psi$. Нельзя предсказать точно, каков будет угол рассеяния ψ , он может иметь любое значение в пределах апертуры φ линзы. В результате импульс электрона становится неопределенным в пределах $\Delta p = h/\lambda \sin \varphi = h/\Delta x$. Это согласуется с соотношением неопределенностей.

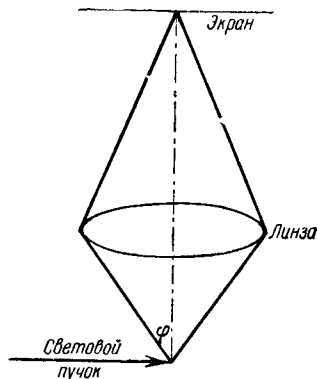


Рис. 17.

Причина возникновения неопределенности заключается не столько в необходимости воспользоваться по крайней мере одним квантом, потерявшим некоторый импульс, сколько в невозможности ни предсказать, ни проконтролировать величину этой передачи импульса, т. е. в невозможности внести поправку, учитывающую этот эффект.

Единственный возможный путь уменьшения неопределенности в определении передаваемого импульса сводится к уменьшению апертуры линзы, т. е. к уменьшению интервала углов рассеяния, создаваемых линзой. Однако это уменьшает разрешающую способность линзы вследствие возрастания эффектов дифракции и приводит к пропорциональному уменьшению точности измерения положения.

кивают принципиальную невозможность рассматривать опыт по наблюдению микрочастицы в микроскопе как опыт над одной частицей. Здесь также необходимо детально учитывать статистическую природу закономерностей микроявлений, изучаемых современной квантовой механикой —

Прим. ред.

В качестве общего вывода можно сказать, что независимо от того, как производится опыт, на каком-то его этапе вводится ограничение точности измерений, соответствующее требованиям соотношения неопределенностей. Это ограничение вызвано тем, что структура материи сильно отличается от той, какая предполагалась в классической теории.

9. Измерение импульса. Рассмотрим метод измерения импульса путем измерения скорости с помощью эффекта Доплера для света, излучаемого частицей. Такой метод практически применяется при измерении скорости излучающих атомов. (Например, скорость звезды часто находят, измеряя так называемое красное смещение.) Связь между смещением Доплера и скоростью v имеет вид

$$\nu' \cong \nu \left(1 - \frac{v}{c}\right) \quad \text{или} \quad \frac{v}{c} = \frac{\nu - \nu'}{\nu}, \quad (5.5)$$

где ν — частота, излученная покоящимся атомом, а ν' — движущимся атомом. Отметим, что формула (5.5) является нерелятивистским приближением.

Положение частицы в момент времени $t=0$ можно, в принципе, зафиксировать с произвольно высокой точностью. Например, это можно было бы сделать, заставив частицу пройти в этот момент через очень тонкую щель. Конечно, при этом не будет известна скорость частицы, хотя именно ее мы и пытаемся измерить. Неопределенность в скорости зависит от точности, с которой можно измерить ν' , а хорошо известно, что неопределенность в определении величины ν' равна $\Delta\nu' \cong 1/\tau$, где τ — время прохождения цуга волн излученного света. Поэтому желательно иметь длинный цуг волн. Длина цуга волн определяется временем, которое требуется атому для излучения энергии. Принципиально цуг волн можно сделать произвольно длинным, выбирая атомы, которые достаточно медленно излучают.

Поскольку излучение происходит квантами, то существует минимально возможная величина импульса, передаваемого электрону, $\Delta p = h\nu'/c$. С той же точностью, с какой возможно мерить ν' , можно вычислить передачу импульса, и если бы были сделаны совершенно точные измерения, то не было бы никакой неопределенности. Это очень важное обстоятельство, показывающее, что существование минимальной возможной величины передаваемого импульса не препятствует измерению импульса частицы с произвольной точностью. Хотя при этом измерении приходится изменять величину импульса, но величина этого изменения известна и поэтому может быть учтена. Неточность в измерении может возникнуть только, если какая-нибудь существенная характеристика системы так изменяется во время измерения, что это изменение нельзя предсказать и контролировать заранее. В рассматриваемом опыте непредсказывае-

мой и неконтролируемой величиной является время испускания кванта света. О нем известно лишь то, что он излучается в какой-то момент времени в интервале от 0 до τ . Мы не в состоянии измерить это время более точно без того, чтобы это не уменьшило возможную точность измерения частоты кванта.

Когда квант уже излучен, то наступает резкое изменение скорости электрона, даваемое выражением $\Delta v = \Delta p/m = h\nu'/mc$. Следовательно, существует интервал времени где-то между 0 и τ , в течение которого электрон может двигаться со скоростью, отличной от той, которую мы измеряем. В результате этого возникает неопределенность в положении, занимаемом частицей, равная

$$\Delta x \cong \tau \Delta v \cong \frac{h\nu'\tau}{mc}.$$

Таким образом, мы получаем

$$\Delta x \Delta p = m \Delta x \Delta v = \frac{h\nu'\tau \Delta v}{c}.$$

Но из уравнения (5.5) имеем

$$\Delta v \cong \frac{c \Delta \nu}{\nu} = \frac{c}{\nu \tau}.$$

Для нерелятивистского случая, который здесь рассматривается, $\nu'/\nu \cong 1$. Поэтому окончательно находим $\Delta x \Delta p \cong h$.

В результате невозможности полных предсказаний и контролируемости времени испускания кванта здесь возникает довольно интересный эффект. Хотя положение электрона перед измерением импульса (при $t=0$) было достаточно точно определено, но динамическая связь между этим положением и положениями, в которые переходит электрон после передачи кванта, нарушается в процессе измерения. Таким образом, хотя импульс в процессе измерения и делается более определенным, но положение при этом делается менее определенным. Аналогичный результат должен был бы получиться и в опыте по измерению положения электрона с помощью микроскопа, если импульс до измерения был точно определен. В этом случае в процессе измерения подобным же образом нарушается динамическая связь между импульсом до и после передачи кванта. Поэтому хотя положение и делается более определенным, но импульс становится менее определенным (в связи с этим см. гл. 8, пп. 14, 15).

10. Соотношение неопределенностей для энергии и времени. В п. 2 мы уже непосредственно указали на соотношение неопределенностей для энергии и времени. Однако можно показать, что это соотношение следует также из формулы $\Delta x \Delta p \geq (\sim h)$. Для этого предположим, что мы измеряем время при помощи частицы,

движущейся с известной скоростью, которая измерялась, например, по способу, описанному выше. Для измерения времени нужно просто знать, когда частица пройдет расстояние $x = vt$ относительно ее первоначального (точно известного) положения. Неопределенность во времени тогда дается выражением $\Delta t \cong \Delta x/v$. Но мы уже видели, что для Δx минимум неопределенности равен $\Delta x \geq (\sim \hbar/\Delta p)$. Следовательно, $\Delta t \cong \hbar/v \Delta p$. Но $\Delta E \cong v \Delta p$, таким образом, $\Delta E \Delta t \geq (\sim \hbar)^*$.

11. Применение соотношения неопределенностей к квантам света. Рассмотрим пакет электромагнитных волн, получающийся, например, при открывании затвора на интервал времени Δt . Таким образом, возникает цуг волн (импульс излучения), приходящий через данную точку пространства за время Δt . Электрическое поле велико только в течение этого времени и ничтожно мало во все другие моменты времени.

Предположим, что цуг волн содержит только один квант. Если этот цуг волн встретит мишень, содержащую много атомов, то какой-то *один* из этих атомов поглотит квант. Поскольку вероятность поглощения пропорциональна величине $|\mathcal{E}|^2$, то практически достоверно поглощение кванта за интервал времени Δt , в течение которого электрическое поле велико в области, содержащей поглощающие атомы. С другой стороны, нельзя ни проконтролировать, ни предсказать точный момент времени, когда квант электромагнитного поля будет передан веществу. Известна лишь вероятность этого процесса, измеряемая величиной $|\mathcal{E}|^2$. Поэтому передача кванта может произойти в любой момент внутри интервала Δt . Следовательно, величину Δt можно рассматривать как неопределенность во времени передачи кванта. Однако известно также, что пакет содержит интервал угловых частот величиной $\Delta \omega \geq 1/\Delta t$, соответствующий интервалу энергий $\Delta E \geq \hbar/\Delta t$. Поэтому нет также способа предсказать или проконтролировать величину энергии в пределах интервала ΔE . Следовательно, во всяком процессе передачи кванта от излучения к веществу (или наоборот) произведение неопределенностей во времени передачи и в величине передаваемой энергии равно $\Delta E \Delta t \geq \hbar$.

Точно так же можно показать, что при этой передаче произведение неопределенности передаваемого импульса Δp на неопределенность положения Δx удовлетворяет соотношению $\Delta p \Delta x \geq \hbar$.

Заметим, что в предыдущих рассуждениях мы тщательно избегали рассматривать свет как совокупность частиц или *фотонов*, как их обычно называют. В процессе излучения или поглощения кванта

) Однако между соотношением неопределенностей для x и p , с одной стороны, и E и t , с другой, имеется существенное различие. Об этом см. [78], § 109, а также [80*] и [81*]. — Прим. ред.

энергия и импульс выступают так, как если бы они относились к частице (см. гл. 2, п. 7). Однако, как следует из теоретических соображений (см. гл. 4, п. 7) и как будет детально показано в следующем пункте, точная локализация такой частицы (кванта света) возможна только в момент ее исчезновения. С другой стороны, в случае электрона можно всегда измерить его положение с желаемой точностью, не разрушая сам электрон (это справедливо только в нерелятивистской теории (см. гл. 4, п. 5)), однако при этом импульс электрона становится менее определенным. По этой причине мы до сих пор избегали говорить о локализации кванта, а вместо этого говорили только о неопределенности *времени передачи*, которое по существу означает время аннигиляции подобной частицы. Если мы хотим трактовать квант света как «фотон», то следует пользоваться этим термином очень осторожно, так как он означает более определенный тип корпускулярной природы, чем тот, которым в действительности обладает свет.

12. Наблюдения кванта света при помощи электронного микроскопа. Для непосредственной иллюстрации ограничений в локализации кванта света (или фотона, если мы решим так его называть

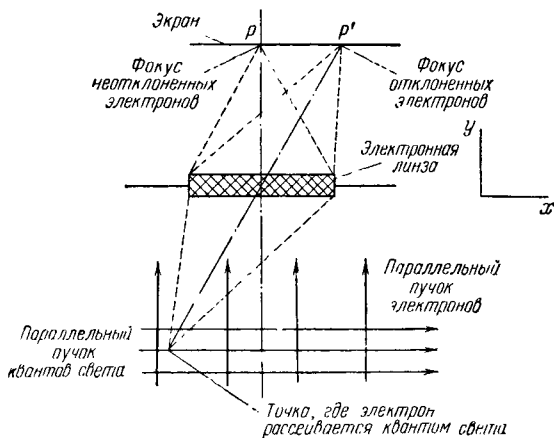


Рис. 18.

воспользуемся для измерения его положения электронным микроскопом. При этом используем взаимное рассеяние квантов света и электронов. Схема соответствующей экспериментальной установки показана на рис. 18.

Направляем пучок параллельно движущихся электронов нормально электронной линзе таким образом, чтобы он имел фокус в точке P . Пучок квантов света при этом пересекает электронный пучок под

прямым углом. По временам электроны рассеиваются и попадают в новый фокус P' . Из положения этой точки P' можно попытаться сделать какой-то вывод о координате x той точки пространства, в которой произошло рассеяние. Следовательно, если представлять себе, что рассеяние обусловлено столкновением электрона с эквивалентным фотоном, то мы тем самым измерим положение этой частицы. (Координаты x отсчитываются в направлении, перпендикулярном электронному пучку и параллельном пучку падающих квантов.)

Заметим прежде всего, что вследствие волновой природы электронов имеется то же общее ограничение точности наблюдений, как и в световом микроскопе. А именно, электронные волны дифрагируют у краев линзы так же, как и световые волны. Основное преимущество электронного микроскопа заключается в гораздо более легкой фокусировке электронов с очень короткой длиной волны по сравнению со светом такой же длины волны. (Вспомним, например, сложную проблему фокусировки, возникающую в рентгеновском микроскопе.) Из сказанного вытекает, что, как и в наблюдениях электрона при помощи фотонов, лучшее, чего можно добиться, это получить соотношение $\Delta x \Delta p \geq \hbar$.

Однако в случае электронов можно всегда сделать величину Δx сколь угодно малой, используя свет очень короткой длины волны. Здесь мы увидим, что при измерениях света существует ограничение в величине минимального значения Δx , которое не зависит от длины электронных волн. Здесь мы ограничимся рассмотрением нерелятивистского случая, учет релятивистских эффектов будет приведен позднее. В нерелятивистском предельном случае можно пренебречь изменением частоты кванта при рассеянии (см. (1.5)). Максимально возможная величина передаваемого импульса от светового кванта к электрону будет при рассеянии кванта на 180° , она равняется $\Delta p_x \cong 2\hbar\nu_q/c$, где ν_q — частота кванта. Это означает, что интервал углов рассеяния электрона будет порядка

$$\Delta\theta \cong \frac{\Delta p_x}{p_{эл}} = \frac{2\hbar\nu_q}{cp_{эл}}.$$

Из оптики хорошо известно, что разрешающая способность линзы зависит не от угловой апертуры линзы, а точнее от угловой апертуры пучка лучей, собираемых линзой в фокусе. Только, если этот пучок покрывает всю поверхность линзы, разрешающая способность определяется апертурой линзы. В общем случае минимальное разрешаемое расстояние дается или формулой $\Delta x \cong \lambda_{эл}/\Delta\theta$, где $\Delta\theta$ — угловая ширина пучка лучей, попадающих на линзу из какой-то заданной точки, или формулой $\lambda_{эл}/\theta$ в зависимости от того, какая из этих величин большая. Следовательно, если $\Delta\theta$ меньше, чем апертура линзы θ , то минимальное разрешимое расстояние соответственно воз-

растает. Для данного случая получаем

$$\Delta x \cong \frac{\lambda_{эл} c p_{эл}}{2 h \nu_q} \geq \frac{\lambda_q}{2}.$$

Здесь мы воспользовались выражением, данным выше для $\Delta\theta$, и соотношениями де Бройля.

Из полученного результата можно заключить, что если мы видим пятно на экране, то неопределенность в определении точки, процесс рассеяния в которой обусловил появление этого пятна, по порядку величины равна длине волны света до рассеяния. Следовательно, пока неизвестна длина световой волны, нельзя на основании этого опыта делать какие-либо определенные выводы о точке, в которой произошло рассеяние света. Даже если известна эта длина волны λ_q , то координату кванта света можно определить лишь с точностью до величины $\lambda_q/2$. С другой стороны, для определения координаты электрона не требовалось никакого предварительного знания его импульса и не было никакого ограничения точности его возможной локализации, если только при его наблюдении использовались кванты с достаточной энергией. Это различие в поведении электрона и светового кванта согласуется с результатами, полученными в гл. 4, п. 7, где теоретически было показано, что понятию положения кванта света нельзя придавать точный смысл, оно может иметь лишь приближенное значение, если не пытаться определить его точнее, чем величина соответствующей длины волны. Приведенное здесь рассмотрение неполно, поскольку ограничено нерелятивистским случаем и предположением, что пучки электронов и фотонов первоначально были взаимно перпендикулярны. Возможно дать и более общую трактовку, однако легко показать, что результаты остаются по существу теми же самыми.

Мы можем прийти к тем же выводам, применив к рассматриваемому случаю непосредственно соотношение неопределенностей. Известно, что максимальная неопределенность величины импульса фотона после того, как он рассеял электрон, равна $2h\nu_q/c$. Если использовать какой-нибудь процесс для очень точных измерений положения, то с ним обязательно связан непредсказываемый и неконтролируемый обмен большим импульсом между измерительным прибором и объектом наблюдения. Так как величина передаваемого импульса при взаимодействии между веществом и светом ограничена выражением

$$\Delta p \cong \frac{2h\nu_q}{c},$$

то предел, до которого можно пользоваться таким способом наблюдения для локализации фотона, также ограничен, согласно соотношению неопределенностей, величиной

$$\Delta x \cong \frac{h}{\Delta p} = \frac{c}{2\nu_q} = \frac{\lambda_q}{2}.$$

Только что приведенный метод анализа показывает, что при любых измерениях положения точность всегда ограничена наибольшим возможным значением импульса, которым обмениваются измерительный прибор и объект наблюдения. Следующие задачи помогут проиллюстрировать важность таких ограничений для нескольких частных случаев.

Задача 3. Показать, что если электроны наблюдаются при помощи протонного микроскопа, то наименьший интервал, в пределах которого электрон

может быть локализован, будет равен либо $\lambda_{эл}$, либо $\frac{m_p}{m_e} \lambda_{прог}$ (в зависимости от того, какой из этих интервалов меньше), где $\lambda_{эл}$ — длина волны электрона до наблюдения. (Используйте нерелятивистскую теорию.)

Задача 4. Показать, что если протоны наблюдаются при помощи электронного микроскопа, то единственным ограничением кратчайшего расстояния, которое можно измерить, является длина волны электронов. (Используйте нерелятивистскую теорию.)

Задача 5. Получить соответствующие ограничения при наблюдении электронов с помощью других электронов. (Используйте нерелятивистскую теорию.)

Из указанных задач видно, что гораздо легче произвести точные измерения на тяжелых частицах при помощи легких частиц, чем наоборот. Поэтому максимальные трудности возникают при попытках наблюдения светового кванта, имеющего нулевую массу покоя. Выводы, полученные из этих задач, сформулированных нерелятивистски, нельзя приложить непосредственно к квантам света, движущимся со скоростью света, но было показано, что такого же типа трудности возникают при попытках измерить положение кванта.

В последовательной релятивистской теории электрона и других частиц возникают трудности, подобные тем, с которыми мы встретились в случае фотона, но они становятся существенными только, если скорость этих частиц близка к скорости света. Для малых значений отношения v/c релятивистская теория приближается к обычной нерелятивистской трактовке, излагаемой в этой книге.

13. Локализация электромагнитной энергии и импульса при помощи щелей и затворов. Мы уже прибегали к затвору, как к способу образования волнового пакета, ограниченного во времени. Аналогично щель может служить средством ограничения волны в определенной области пространства. В соответствии с соотношением неопределенностей в этом случае можно ожидать, что если один квант проходит через щель шириной Δx , то его импульс делается неопределенным по крайней мере в пределах $\Delta p \cong \hbar/\Delta x$, а если он проходит при открытом затворе за интервал времени Δt , то его энергия должна стать неопределенной по крайней мере в пределах $\Delta E \cong \hbar/\Delta t$.

Мы вправе спросить: какой механизм создает эти неопределенности? Раньше всего заметим, что даже в классической теории вслед-

ствие давления излучения допускается возможность передачи импульса от краев щели к волне и обратно. Аналогично движущийся затвор, который открывается и закрывается, совершает работу против давления излучения и может потому обмениваться энергией с электромагнитным полем. В классическом пределе этот обмен происходит по динамическому закону давления излучения, но в квантовой области взаимодействие должно состоять из дискретных переходов, которые нельзя ни предсказать, ни проконтролировать. Таким образом, возникает возможность неопределенных передач импульса и энергии.

Задача 6. Показать, что из-за дифракционных эффектов один квант, проходя через щель шириной Δx , приобретает неконтролируемым образом импульс $\Delta p \cong \hbar/\Delta x$, являющийся следствием соотношения неопределенностей для этого случая. Показать также, что затвор, открытый в течение промежутка времени Δt , может передать кванту неконтролируемым образом энергию $\Delta E \cong \hbar/\Delta t$. Подробно разобрать проявление корпускулярно-волнового дуализма в создании этой неопределенности.

14. Применение соотношения неопределенностей к задаче определения орбит в атомах. Когда шла речь о волнах де Бройля (гл. 3), то указывалось, что если электрон в атоме находится в состоянии с определенной энергией, то он может быть в любой точке внутри некоторой области, расположенной вблизи орбиты классической частицы с той же энергией. Но точного положения электрона на такой орбите нельзя предсказать. Для получения состояния, в котором электрон имеет определенное положение, нужно построить волновой пакет, содержащий волны со многими возможными энергиями. Таким образом, наблюдение положения приводит к тому, что электрон будет находиться где-то в области, соответствующей размазыванию по многим возможным состояниям с различными энергиями, и что измерение энергии может обнаружить любую из этих величин с вероятностью, зависящей от интенсивности, с которой волна, соответствующая этой энергии, входит в волновой пакет.

Покажем теперь, что это предсказание соответствует тому, что фактически должно наблюдаться, если, например, воспользоваться микроскопом для измерения положения электрона на его орбите. Ради простоты ограничимся случаем больших квантовых чисел, когда разности энергий соседних орбит очень малы. Предположим, что мы хотим измерить момент времени, при котором электрон проходит через данную точку пространства с точностью Δt . Из ряда таких измерений можно было бы попытаться построить орбиту электрона. Для определения времени рассеяния света с точностью Δt надо воспользоваться импульсами света продолжительностью Δt или меньше. Чтобы создать такие импульсы, требуется область частот $\Delta \omega \geq 1/\Delta t$ и, следовательно, область энергий $\Delta E \geq \hbar/\Delta t$. Конечно, желательно выбрать Δt значительно меньшим, чем период вращения электрона на орбите, так как в противном случае невозможно следить за его

движением. Но, согласно теории Бора — Зоммерфельда,

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\partial E}{\partial J} \cong \frac{\Delta E'}{\Delta J}.$$

Если выбрать $\Delta J = h$, то величина $\Delta E'$ будет равна разности энергий соседних орбит, т. е. $\Delta E' \cong h/\tau$. Поскольку $t \ll \tau$, то $\Delta E \gg \Delta E'$, и энергия кванта более чем достаточна для того, чтобы перебросить частицу на следующую орбиту.

Таким образом, мы приходим к выводу, что нельзя проследить за движением частицы вдоль одной боровской орбиты, наблюдая за ней в микроскоп, не только потому, что кванты, используемые при наблюдении, перебрасывают электрон на какую-то другую орбиту, но и из-за невозможности предсказать и определить, на какую именно другую орбиту перешел электрон. Этот результат согласуется с тем фактом, что волновой пакет с определенным положением на орбите должен содержать волны, соответствующие многим энергиям.

Из этого гипотетического эксперимента можно сделать весьма интересные заключения. При помощи волновой картины можно проследить переход электрона с одной орбиты на следующую, однако нельзя объяснить, почему электрон всегда находится на одной из орбит и никогда не обнаруживается между орбитами. При помощи корпускулярной модели и квантовых условий Бора — Зоммерфельда можно понять, почему частица всегда находится на определенной орбите, но при этом невозможно описать процесс перехода между орбитами. С другой стороны, соотношение неопределенностей показывает, что при наблюдении за частицей в процессе перехода мы передаем ей неопределенную величину энергии и поэтому не знаем, на какой орбите она будет находиться. Следовательно, переход между состояниями с определенными энергиями не может происходить непрерывно, в противном случае он должен был бы быть между состояниями с неизвестными энергиями. Таким образом, хотя корпускулярная модель и не дает сведений о процессе перехода, но она никогда не приводит к противоречиям, так как в рамках такой модели этот процесс вообще ненаблюдаем.

15. Более общее применение соотношения неопределенностей. Все вышеприведенные примеры показывают, что при вмешательстве измерительного прибора всегда наблюдается непредсказываемый и неконтролируемый процесс передачи кванта, который препятствует выводу о существовании однозначной связи между состояниями измерительного прибора и наблюдаемого объекта. На первый взгляд может показаться, что этой трудности можно было бы избежать, если рассматривать прибор и наблюдаемый объект как части общей системы. Например, можно рассматривать сложную систему, состоящую из камеры, фотопластинки, световых лучей и изображения. Тогда вопрос о передаче кванта не должен возникать, потому что мы имеем дело

только с одной системой. (Энергия и импульс такой системы являются общими свойствами, которые принадлежат всем частям системы. Только в том случае, когда мы пытаемся изолировать какую-то заданную часть системы, возникает задача о передаче кванта от одной части к другой.)

Основной трудностью описанной выше процедуры является то, что она не дает нам никаких сведений о системе. Для получения информации о такой системе необходимо как-то вступить с ней во взаимодействие, например рассмотреть ее изображение на фотопластинке, при этом надо воспользоваться светом. Хотя свет, используемый для наблюдения положения на пластинке, в общем случае не изменит заметно изображения на этой пластинке, но тем не менее он передаст пластинке непредсказываемый и неконтролируемый импульс $\Delta p \cong \hbar \Delta x$ точно таким же образом, как и в случае электрона, положение которого наблюдалось непосредственно с помощью микроскопа (см. п. 8). Следовательно, при использовании пластинки для получения сведений о местоположении электрона мы неизбежно делаем неопределенным импульс сложной системы (камера, пластинка и электрон). Отсюда можно заключить, что отсутствуют и косвенные пути обхода соотношения неопределенностей с помощью исключения того этапа измерений, где имеет место передача непредсказываемого и неконтролируемого кванта.

16. Внутренняя непротиворечивость квантовой теории. В п. 2 было показано, что соотношение неопределенностей вытекает из трех предположений: о волновых свойствах материи, о квантовой природе передачи энергии и импульса и других корпускулярных свойств материи и об отсутствии полного классического детерминизма. Затем, анализируя различные процессы измерений, было показано, что действительно подтверждаются ограничения, предсказываемые классическим детерминизмом. Но также чрезвычайно важно отметить, что если не было бы *непредсказываемой* передачи *неделимого* кванта света, обладающего *и корпускулярными, и волновыми свойствами*, то было бы возможно измерить положение и импульс электрона с точностью, большей чем это допускается соотношением неопределенностей. Подобные же выводы получаются и при анализе действия электронного микроскопа, если его использовать для измерений частиц иной природы, чем электрон. Действительно, если бы где-либо во вселенной существовала система, которая не обладала бы одновременно квантовой природой, статистическими свойствами и корпускулярно-волновым дуализмом, то эту систему можно было бы использовать для измерений других систем с точностью, большей чем это допускается соотношением неопределенностей. В результате один из самых фундаментальных выводов квантовой теории оказался бы неправильным. Таким образом, упомянутые три элемента квантовой теории образуют единство, которое распалось бы, если бы один из них

отсутствовал в любом объекте вселенной. Следовательно, все эти части квантовой теории сплетаются в такую единую систему, что очень трудно представить себе возможность исключения какого-нибудь одного из этих элементов без потери всей квантовой теории.

17. Существуют ли скрытые параметры, лежащие в основе квантовой теории? Имея в виду единство квантовой теории, выясним возможность объяснения квантовых явлений при помощи скрытых параметров, которые бы фактически определяли, где и когда имеет место каждый квантовый переход, тогда появление вероятности было бы просто результатом нашего пренебрежения истинными переменными, выражающими динамические закономерности (см. гл. 2, п. 5 и гл. 5, п. 3).

Предположим, что такие скрытые параметры существуют. Для наблюдения их надо найти какие-то опытные факты, зависящие от состояния этих скрытых параметров, в противном случае они будут лишены какого-либо физического смысла. Однако во всех опытах, которые когда-либо до сих пор производились, подтверждались все выводы квантовой теории, включая и тот, согласно которому нельзя ни предсказать, ни проконтролировать точное время и место передачи кванта. Таким образом, если даже скрытые параметры и существуют, то ни один из проведенных до сих пор опытов никогда не зависел ни от чего более точного, чем статистическое среднее от этих параметров (аналогично давлению и температуре в термодинамике), и потому пока ни один опыт не подтвердил ни одного признака существования скрытых параметров. Больше того, в гл. 22, п. 19 мы покажем, что вообще нельзя согласовать общую структуру квантовой теории с предположением о существовании скрытых параметров, которые бы в действительности определяли все физически существенные явления. Другими словами, невозможно даже мысленно представить себе какой-то вполне причинно обусловленный механизм, который мог бы правильно объяснить наблюдаемый корпускулярно-волновой дуализм свойств материи. Раньше чем мы смогли бы подтвердить предположение о существовании такой теории, которая в основе полностью классически детерминирована, необходимо было бы доказать, что квантовая теория не полностью согласуется с опытом. Но до сих пор было найдено, что квантовая теория находится в полном согласии с результатами экспериментов в очень широкой области и ни в одном случае не противоречит опыту. Конечно, всегда есть возможность, что для новой до сих пор не изучавшейся области результаты эксперимента могут не совпасть с предсказаниями квантовой теории, и там обнаружатся явления, в которых скрытые параметры не усредняются. Если даже это когда-нибудь случится, то необходимо будет так существенно изменить квантовую теорию, чтобы во всех явлениях, с которыми мы имели дело до сих пор, новая теория в пределе переходила в современную квантовую теорию.

Однако получение полностью классически детерминированного описания при помощи скрытых параметров в настоящее время кажется совершенно неправдоподобным. Хотя и верно, что в области релятивистской квантовой теории и при изучении природы элементарных квантовых частиц современная квантовая механика является неполной, но все указывает на такую тенденцию дальнейшего ее развития, при которой возможность причинного описания будет пригодна даже меньше, чем в современной квантовой теории. До тех пор пока мы не найдем каких-либо веских доводов для замены применяемого ныне общего метода квантового описания, нецелесообразно искать возможности применения скрытых параметров. Наоборот, следует считать, что статистические законы существенным образом связаны с самой структурой материи. В гл. 8 мы вернемся к этому вопросу и постараемся показать, что такая точка зрения в основном столь же, а может быть и более разумна, чем предположение о полном детерминизме *).

*) Наиболее уязвимым пунктом при введении в квантовую механику скрытых параметров является то, что при этом предполагается возвращение к классической механике. Мы можем в принципе говорить о том, что существуют какие-то материальные связи, которые не учитываются в современной квантовой механике и которые можно назвать скрытыми параметрами. Однако эти более глубинные связи отнюдь не классического типа, а, как показывает дальнейшее развитие теории (квантовая электродинамика, теория квантованных молей и т. п.), их учет еще дальше уводит нас от механического «идеала» классической теории. Кроме того, надо всегда помнить, что материальные связи образуют неисчерпаемую совокупность (принцип неисчерпаемости материи по Ленину), и поэтому ни при каких условиях и в будущем невозможно «реставрация» лапласовского детерминизма.

Рекомендуем читателю более простое математическое доказательство теоремы Неймана о невозможности существования классических скрытых параметров в квантовой механике, данное в работе Альбертсона [90*]. См. также примечание в конце гл. 8 (стр. 208). — *Прим. ред.*

ВОЛНОВЫЕ И КОРПУСКУЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА МАТЕРИИ

Одной из самых характерных черт квантовой теории является корпускулярно-волновой дуализм (см., например, гл. 2, п. 1; гл. 3, п. 11; гл. 5, п. 2), т. е. способность вещества или светового кванта обнаруживать явления интерференции (волновые свойства) и одновременно проявляться в форме локализованных частиц даже после того, как имела место интерференция. В этой главе мы более детально рассмотрим природу этих явлений, чтобы показать, в каких пределах материю можно рассматривать как волну и в каких как частицу.

1. Явление интерференции и корпускулярно-волновая природа материи. Существование интерференционных полос является наиболее важным фактом, на котором основывается предположение о волновых свойствах материи. Поэтому начнем с рассмотрения природы интерференционных полос, с которыми встречаются, например, в явлениях дифракции электрона или фотона. Отдельный электрон (или фотон) после прохождения системы щелей или кристалла оставляет на фотопластинке (или каком-нибудь другом индикаторе) одно пятно или след. Если *затем* пропустить вторую частицу, то она добавит на индикаторе еще одно пятно или след. Если через эту систему *независимо* проходит много таких частиц с одинаковым начальным импульсом, то со временем на индикаторе статистически получаются полосы из пятен или следов, в которых наблюдаются максимумы и минимумы плотности пятен, весьма напоминающие оптические интерференционные полосы. Так как электроны проходят через систему щелей по отдельности и независимо друг от друга, то взаимодействие между электронами не может обусловить появление этих интерференционных полос *).

Если рассматривать электрон только как классическую частицу, то это явление действительно очень трудно понять. Однако мы видели, что в квантовой теории интерференцию можно описать количественно с помощью волновой функции $\psi(x, t)$, которая связана

) Это стало особенно ясным после известных опытов Бибермана, Сушкина и Фабриканта в 1949 г. [82]. — *Прим. ред.*

со свойствами отдельного электрона: вероятность найти этот электрон в данной точке пространства пропорциональна произведению $\psi^*(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t)$. Если все электроны обладают одинаковым начальным импульсом $\mathbf{p}_0$, то тогда с каждым из них должна быть связана одинаковая волновая функция — плоская волна $\exp(i\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{x}/\hbar)$. Это следует из того, что электрон может иметь заданный импульс $\mathbf{p}_0$ только, когда его волновой вектор*) равен $\mathbf{k} = \mathbf{p}_0/\hbar$. Так как волновые функции, связанные с каждым электроном, все распространяются одинаково, то, следовательно, даже после дифракции каждый электрон по-прежнему будет связан со своей волновой функцией, такой же, как и у любого другого электрона. Это, конечно, означает, что все электроны имеют одну и ту же плотность вероятности.

Таким образом, после того, как много таких электронов прошли через систему щелей, результирующая плотность пятен будет пропорциональна $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$. Однако может случиться, что в некоторых точках $\psi(\mathbf{x}, t)$ исчезнет вследствие интерференции между волнами, приходящими от нескольких щелей, в то время как если бы была открыта только одна из щелей, то этим точкам должна была бы соответствовать конечная вероятность. Наоборот, в других точках вероятность может быть больше, чем сумма вероятностей от отдельных щелей. Поэтому мы можем получить интерференционное увеличение или уменьшение волновой функции, определяющей вероятность попадания электрона в заданную точку пространства.

Из сказанного выше можно заключить, что с одним электроном нельзя фактически получить и исследовать интерференционные полосы, и поэтому волновые свойства материи ясно проявляются только при участии достаточного числа электронов, образующих статистический ансамбль. Можно спросить, почему вообще считается, что отдельный электрон обладает волновыми свойствами, если всегда наблюдается, что он достигает индикатора в определенном месте точно так же, как если бы он был частицей. Ответ таков: для объяснения появления даже статистически интерференционных полос необходимо приписать материи определенные волновые свойства по крайней мере в процессе прохождения через систему щелей. Если предположить, что электрон *всегда* ведет себя как частица, то мы должны были бы заключить, что он может проходить одновременно только через одну щель. Тогда трудно было бы понять, почему открытие другой щели, даже удаленной на большое расстояние, может привести к тому, что электроны перестанут попадать в определенные точки пространства, в которые в противном случае они могли бы попасть с большой вероятностью. Такое дальное действие щелей на частицы действительно

*) Строго говоря, используемая здесь плоская волна является лишь приближением к волновому пакету, который, однако, обычно практически настолько широк, что эту ширину можно считать бесконечной при объяснении большинства опытов по дифракции.

противоречит всем нашим предыдущим опытам с частицами. Можно пытаться представить себе различные видоизменения силового взаимодействия между электронами и системой щелей, чтобы попытаться объяснить этот результат, но, как мы увидим в п. 11, эта попытка привела бы ко всякого рода гипотезам *ad hoc*. *), которые противоречили бы некоторым наиболее элементарным требованиям разумной теории. С другой стороны, волновая интерпретация материи объясняет этот результат, а также множество других результатов сравнительно просто и к тому же количественно правильно. Таким образом, можно сделать вывод, что даже отдельному электрону присущи определенные волновые свойства.

Все это приводит к мысли, что электрон не частица и не волна, а какой-то третий вид материи, который обладает некоторыми, но не всеми свойствами и частиц, и волн (см. гл. 5, п. 2). В зависимости от обстоятельств сильнее проявляются или волновые, или корпускулярные свойства микрообъекта. Поэтому ниже под термином *электрон* мы не будем понимать ни волну, ни частицу, а просто тот микрообъект, которым он является: вылетает из горячей нити накаливания, несет элементарный заряд, обладает определенным отношением заряда к массе, испытывает определенное отклонение в электрическом и магнитном полях, обладает дифракционными свойствами в опытах Дэвиссона — Джермера, определенными энергетическими

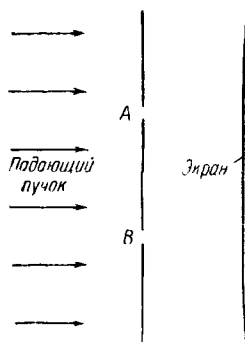


Рис. 19.

уровнями в атоме водорода и т. д. Задача гл. 6, 7, 8 будет заключаться в том, чтобы дать более подробное описание свойств этого микрообъекта.

2. Невозможность одновременного наблюдения волновых и корпускулярных свойств материи. Для выяснения, будет ли электрон (или фотон) больше похож на волну или частицу, можно попытаться исследовать, что происходит с ним при дифракции. В качестве примера рассмотрим мысленный опыт, в котором электроны (с одинаковым начальным импульсом и потому с одинаковыми волновыми функциями (см. п. 1)) проходят по одному через систему, состоящую из двух щелей и экрана, расположенного вправо от этих

щелей (рис. 19). Конечная цель этого опыта — обнаружить, куда попадет электрон, если он проходит через одну щель в некоторый момент, как если бы он был частицей, и куда он попадет, если он проходит одновременно через обе щели, как если бы он был волной. Для этого можно в каждом случае наблюдать за электроном

*) По-латыни буквально: «к этому», специально для данного случая, для определенной цели. — *Прим. ред.*

при помощи микроскопа, освещая пространство около щелей интенсивным светом, чтобы с уверенностью получить рассеяние, по крайней мере одного кванта, каждым электроном при его прохождении через щель. Тогда для того, чтобы выяснить, проходит ли электрон через одну щель или через обе, надо пользоваться светом с длиной волны, не большей чем a , где a — расстояние между щелями. Как показано в гл. 5, п. 8, такой световой квант может передать электрону импульс, величина которого определяется с точностью до $\Delta p \cong h/a$. Тогда угол рассеяния будет иметь неопределенность, равную

$$\Delta\theta \cong \frac{\Delta p}{p} = \frac{h}{ap} = \frac{\lambda_{эл}}{a},$$

где $\lambda_{эл}$ — длина волны электрона. Эта неопределенность равна разности углов, соответствующих минимумам интерференционных полос, поэтому добавление неопределенного импульса приводит к нарушению интерференционных полос. Действительно, в п. 4 будет показано, что для измерений, достаточно точно определяющих щель, через которую проходит каждый электрон, на экране не будет обнаружено никаких следов интерференции. С другой стороны, если попытаться избежать этого исчезновения интерференционных полос, воспользовавшись квантами большой длины волны, то измерения не будут достаточно точны, чтобы уверенно сказать, через какую щель прошел электрон. Таким образом, мы приходим к выводу, что невозможно одновременно наблюдать, через какую щель прошел каждый электрон, и получить интерференционные полосы. Другими словами, электрон может пройти одновременно только через одну щель, как если бы он был частицей, но только при этом теряются его волновые свойства, проявляющиеся в интерференции. С другой стороны, интерференцию (т. е. волновые свойства) можно обнаружить только при таких условиях, когда нельзя определить щель, через которую проходит электрон.

Этот вывод не зависит от способа определения щели, через которую проходит электрон, рассмотрим, например, что произойдет, если вместо регистрирующего экрана воспользоваться камерой Вильсона. В камере Вильсона отмечается не только, как на экране, место попадания электрона, но и, поскольку электрон оставляет видимый след (трек), направление его движения. Экстраполируя линию этого трека в обратном направлении, возможно, что мы сумели бы определить, через какую щель прошел электрон. Схема этого опыта показана на рис. 20.

Однако следует помнить, что поведение электрона в камере Вильсона также ограничено соотношением неопределенностей. Он оставляет трек, передавая кванты окружающим атомам, которые вследствие этого ионизируются и служат центрами конденсации для капелек воды, делающих этот трек видимым. Но при передаче кванта от электрона к атому электрон претерпевает неконтролируемое изменение импульса, поэтому он отклоняется на неточно определенный угол. Согласно соотношению неопределенностей, изменение импульса равно $\Delta p \cong h/\Delta x$, где Δx — неопределенность измерения

координаты. Тогда неопределенность в угле отклонения равна $\Delta\varphi \cong \frac{\Delta p}{p} \cong \frac{\hbar}{p \Delta x}$. Неопределенность в угле вызывает неопределенность ΔX координаты*), пересечения электроном системы щелей. Эта неопределенность равна $\Delta X \cong \Delta\varphi d \cong \hbar d / p \Delta x$, где d — расстояние между камерой Вильсона и системой щелей. (Последняя формула применима только в том случае, если $a/d \ll 1$.)

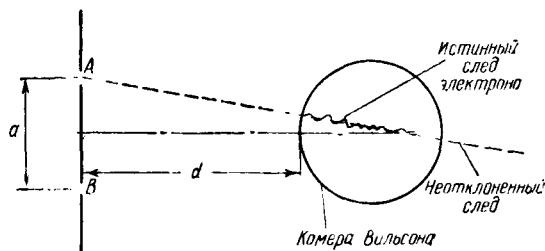


Рис. 20.

Для того чтобы выяснить, существуют ли интерференционные полосы, необходимо измерить положение электрона в камере Вильсона с точностью

$$\Delta x \cong \Delta\theta d \cong \frac{\lambda_{\text{эл}} d}{a},$$

где $\Delta\theta$ — угол между направлениями на максимум и минимум в дифракционных полосах. Если положение электрона измеряется с меньшей точностью, то нельзя обнаружить, попадает ли электрон в точку, где функция $|\psi|^2$, например, максимальна или равна нулю, и потому нельзя наблюдать интерференционные полосы. Используя формулу $\lambda_{\text{эл}} = h/p$, получаем

$$\Delta x \cong \frac{\hbar d}{ap} \quad \text{и} \quad \Delta X \cong \frac{\hbar apd}{p \hbar d} \cong a.$$

Таким образом, так же как в случае с микроскопом, получается, что невозможно наблюдать интерференционные полосы, если обнаружено, через какую щель прошел электрон; и наоборот, невозможно обнаружить, через какую щель прошел электрон, если получены интерференционные полосы.

Следует отметить, что до сих пор мы рассматривали только дифракционные полосы, которые возникают вследствие интерференции волн, приходящих от двух различных щелей. Существуют также полосы, возникающие от тех волн, которые приходят от различных частей одной и той же щели. Если, однако, щели очень узки по сравнению с расстоянием между ними, то изменения в полосах, возникающие по этой причине, ничтожны по сравнению с изменениями, возникающими от интерференции между щелями. Поэтому при желании можно пренебречь эффектами конечной ширины отдельных щелей.

*) Это минимальное значение неопределенности получается при определении направления по двум точкам ионизации; если используется большее число точек, то неопределенность возрастает.

3. Влияние процесса наблюдения на волновую функцию.

Вернемся теперь к опыту, в котором положение электрона при прохождении через систему щелей определялось при помощи микроскопа. Перед актом наблюдения волновая функция, конечно, покрывала обе щели, так как в противном случае не было бы интерференции. Однако после наблюдения мы находим, что электрон находится либо около одной щели, либо около другой. В этом новом состоянии волновая функция должна иметь вид пакета с максимумом вблизи той щели, где был фактически обнаружен электрон.

Таким образом, при наблюдении положения электрона происходит редукция (сведение) волновой функции от широкого фронта к узкой области пространства. Величина области, до которой происходит редукция, не может быть определена точно по виду первоначальной волновой функции. Можно определить лишь вероятность редукции в область заданной величины, пропорциональную величине $|\psi|^2$ в этой области.

Такой тип редукции волновой функции не имел места ни в одной классической волновой теории. Почему же он происходит здесь? Для ответа на этот вопрос необходимо принять во внимание, что в процессе наблюдения имеет место взаимодействие между частицей и измерительным прибором. Уравнение Шрёдингера (3.29), определяющее волновую функцию $\psi(x, t)$, относится только к свободной частице.

Наличие любого взаимодействия (например, электрического, гравитационного, электромагнитного и т. д.) должно изменить уравнение Шрёдингера. Например, в микроскопе при наблюдении электрона используется электромагнитный квант, присутствие которого изменяет волновое уравнение для электрона. В гл. 22 будет детально исследован точный вид таких изменений, здесь же мы рассмотрим лишь некоторые результаты, полученные там.

Прежде всего рассмотрим уже приводившийся ранее пример электрона, проходящего через систему из двух щелей (см. рис. 19). Как и в оптике, распространение электронных волн может быть описано с помощью принципа Гюйгенса (см. [25], § 7). Это означает, что если известна величина волновой функции на данном фронте волны, то в любой точке можно определить ее величину как сумму отдельных волн от различных элементов этого фронта волны, причем каждое из слагаемых умножается на фазовый фактор $\frac{\exp(2\pi i r/\lambda)}{r}$, где r — расстояние от рассматриваемой точки пространства до соответствующего элемента поверхности фронта волны.

В опыте с двумя щелями все составляющие в волновой функции для точек пространства справа от щелей возникают или от щели A , или от щели B . Если обозначить волновую функцию от щели A через $\psi_A^0(x_s)$, а от щели B через $\psi_B^0(x_s)$, где x_s — значение

координаты произвольной точки в плоскости щели, то, согласно принципу Гюйгенса, волновая функция в произвольной точке x в пространстве справа от щелей равна

$$\psi(x) \sim \int_A \frac{\exp [2\pi i (x - x_s)/\lambda]}{|x - x_s|} \psi_A^0(x_s) dx_s + \\ + \int_B \frac{\exp [2\pi i (x - x_s)/\lambda]}{|x - x_s|} \psi_B^0(x_s) dx_s, \quad (6.1)$$

где dx_s указывает на интегрирование по плоскости щели A или щели B , как сказано выше. Выражение (6.1) можно записать короче

$$\psi(x) = \psi_A(x) + \psi_B(x),$$

где $\psi_A(x)$ представляет ту часть волны, достигающую точки x , которая приходит от щели A , а $\psi_B(x)$ — от щели B .

Если открыта только одна щель A , то вероятность достижения частицей точки x должна быть равна $P_A(x) = |\psi_A(x)|^2$, а если была открыта только одна щель B , то эта вероятность должна быть равна $P_B(x) = |\psi_B(x)|^2$. Если же открыты обе щели, то вероятность будет

$$P(x) = |\psi_A(x) + \psi_B(x)|^2 = P_A(x) + P_B(x) + \psi_A^*(x)\psi_B(x) + \\ + \psi_B^*(x)\psi_A(x). \quad (6.2)$$

Таким образом, кроме членов от «отдельных щелей» P_A и P_B вероятность $P(x)$ содержит интерференционные члены $\psi_A^*\psi_B + \psi_B^*\psi_A$, которых не должно быть, если бы в опыте мы имели дело только с вероятностью распределения классических частиц, проходящих либо только через щель A , либо только через щель B . Эти интерференционные члены отражают специфическое влияние волновых свойств материи.

Выясним теперь, что произойдет с волновой функцией электрона при наблюдении его положения. Как будет показано в гл. 22, процесс взаимодействия, неизбежный при наблюдении, всегда изменяет волновую функцию ψ ; при этом невозможно ни предсказать, ни контролировать совершенно точно это изменение *). Можно лишь приближенно предполагать, что подобное изменение обусловлено неконтролируемым квантом, который использовался в процессе из-

*) Здесь, как и повсюду в книге, когда автор говорит о *непредсказуемости* и *неконтролируемости* квантовых явлений, эти термины нужно понимать так, что невозможно говорить о классическом динамическом предсказании и контроле, однако это нисколько не умаляет объективной закономерности процессов квантовых взаимодействий. — Прим. ред.

мерения (см. гл. 5, п. 8). Вообще говоря, этот квант может произвести множество разнообразных изменений в наблюдаемой системе, которые отразятся в соответствующих изменениях волновой функции. Однако всегда возможно так выбрать измерительный прибор, чтобы исследуемые свойства не изменялись в процессе измерения. Например, если микроскоп используется для определения координаты электрона, то она не изменяется при рассеянии кванта, участвующего в измерении, а изменяется лишь импульс. (Конечно, после окончания измерения координата изменится, но это изменение уже не имеет отношения к нашим рассуждениям.) В гл. 22 мы увидим, что при этих условиях каждая часть волновой функции, соответствующая определенному положению электрона в момент измерения, изменяется в процессе взаимодействия электрона с измерительным прибором таким образом, что она умножается на непредсказываемый и неконтролируемый фазовый фактор $e^{i\alpha}$. Например, в исследуемом случае волновая функция примет вид

$$\psi = \psi_A(x) e^{i\alpha_A} + \psi_B(x) e^{i\alpha_B}, \quad (6.3a)$$

где α_A и α_B — различные постоянные, которых нельзя ни предсказать, ни определить.

В гл. 22 будет детально показано, почему появляются эти изменения фазы. Здесь мы ограничимся лишь весьма грубыми качественными соображениями. При любом взаимодействии между электроном и измерительным прибором всегда имеется некоторое время Δt , являющееся продолжительностью взаимодействия. В течение этого времени описание электрона как изолированной системы становится неадекватным действительности, и энергия определяется не только состоянием электрона, но также и квантом, участвующим в процессе взаимодействия.

Волновая функция осциллирует как величина $\exp(-iEt/\hbar)$. В течение времени взаимодействия энергия будет неопределенной на некоторую величину ΔE , которая, согласно принципу неопределенностей, равна $\Delta E \cong \hbar/\Delta t$. Поэтому неопределенность в фазе волновой функции будет по крайней мере равна произведению $\Delta E \Delta t / \hbar \cong 2\pi$. Таким образом, фаза волновой функции делается полностью неопределенной*), и динамическая связь между фазой до взаимодействия и фазой после взаимодействия отсутствует. Кроме того, в гл. 22 мы также увидим, что нет определенного соотношения между α_A и α_B , поэтому разность фаз $\alpha_A - \alpha_B$ также нельзя ни предсказать, ни проконтролировать.

*) Фактически, как будет показано в гл. 22, это изменение фазы во всех практических случаях будет гораздо больше, чем 2π .

Если используемый измерительный прибор изменяет измеряемую величину, то изменение ψ , возникающее в процессе взаимодействия с прибором, будет более сложным, но мы не будем здесь рассматривать такой возможности, поскольку можно показать, что она не меняет существенным образом полученных выводов.

Для иллюстрации значения этих изменений волновой функции вычислим теперь плотность вероятности

$$\psi^*(x)\psi(x) = P_2(x) = |\psi_A|^2 + |\psi_B|^2 + \psi_A^*\psi_B \exp[i(\alpha_B - \alpha_A)] + \psi_B^*\psi_A \exp[i(\alpha_A - \alpha_B)]. \quad (6.36)$$

Мы видим, что взаимодействие с измерительным прибором изменило интерференционные члены, но не повлияло на члены «изолированных щелей» $|\psi_A|^2$ и $|\psi_B|^2$. В тех точках, где волновые функции $\psi_A(x)$ и $\psi_B(x)$ не перекрываются и потому не интерferируют, фазовые факторы не играют никакой роли. Такие точки есть, например, непосредственно на самих щелях. Следовательно, взаимодействие с измерительным прибором не изменит вероятности нахождения частицы на самой системе щелей. Этот результат можно было более или менее ожидать, так как мы рассматриваем только те методы наблюдений положения, которые не изменяют его, так что распределение вероятностей положения около щелей остается неизменным в течение измерения. Однако статистическое распределение частиц где-нибудь в другом месте пространства может значительно измениться, потому что «интерференционные члены» в уравнении (6.36) умножаются на фазовые факторы $\exp[i(\alpha_B - \alpha_A)]$ и $\exp[i(\alpha_A - \alpha_B)]$. Например, в точке, расположенной достаточно далеко вправо от щелей, где $\psi_A(x)$ и $\psi_B(x)$ заметно перекрываются, фактор $\exp[i(\alpha_A - \alpha_B)]$ может настолько изменить характер интерференции, что вместо минимума может появиться максимум, т. е. вероятность попадания частиц в эту точку возрастает.

В каждом отдельном эксперименте α_A и α_B определяются лишь как неизвестные и неконтролируемые постоянные. Но, как указывалось в п. 1, величина $P_2(x)$ имеет смысл только постольку, поскольку она относится к совокупности одинаковых опытов, проводимых при эквивалентных начальных условиях. Таким образом, функция вероятности, которой здесь надо пользоваться, является средним значением произведения $\psi^*\psi$, усредненным по результатам многих экспериментов. Так как фазы $\alpha_A - \alpha_B$ флуктуируют хаотически, неконтролируемым образом от одного опыта к другому, то члены типа $\exp[i(\alpha_A - \alpha_B)]$ при усреднении дают нуль, и единственными остающимися членами будут слагаемые от отдельных щелей, а именно $|\psi_A|^2$ и $|\psi_B|^2$. Следовательно, после того как электрон провзаимо-

действовал с прибором (это дало нам возможность выяснить, через какую щель он прошел), волны, прошедшие через каждую из щелей, перестают интерферировать, несмотря на то, что они продолжают перекрываться.

4. Нарушение интерференции и непротиворечивость корпускулярно-волнового дуализма. Здесь будет показано, что статистическая интерпретация волновой функции вместе с явлением нарушения интерференции, обусловленного взаимодействием электрона с измерительным прибором, позволяют получить непротиворечивую формулировку корпускулярно-волнового дуализма. Предположим, например, что результаты измерения положения электрона под микроскопом автоматически регистрируются на фотопластинке. Положение пятна, появляющегося на фотопластинке, будет зависеть от того, через какую щель A или B прошел электрон. Если прибор работает правильно, то наблюдатель, рассматривая пластинку, может определить, через какую щель прошел электрон. Однако, даже не глядя на фотопластинку, наблюдатель знает, что прибор покажет прохождение электрона через одну из двух щелей (как если бы он был частицей), а не через обе сразу (как если бы он был волной).

Разберем теперь, как следует описать эти результаты с помощью волновой функции электрона. До взаимодействия прибора с электроном волновая функция имела вид $\psi = \psi_A(x) + \psi_B(x)$, после же взаимодействия она определяется выражением $\psi_A(x)e^{i\alpha_A} + \psi_B(x)e^{i\alpha_B}$. Вследствие неконтролируемых изменений в фазах α_A и α_B интерференция между волнами $\psi_A(x)$ и $\psi_B(x)$ нарушается, и в результате вероятность обнаружения частицы в точке x оказывается равной (см. п. 3)

$$P = P_A(x) + P_B(x).$$

Но эта функция как раз такая, какая получилась бы для распределения классических частиц, проходящих через каждую щель в отдельности. Следовательно, электрон во всех отношениях ведет себя так, как если бы он, подобно частице, проходил через одну определенную, но неизвестно какую щель с вероятностью

$$P_A = \int \psi_A^*(x) \psi_A(x) dx,$$

что это будет щель A , и с вероятностью

$$P_B = \int \psi_B^*(x) \psi_B(x) dx,$$

что это будет щель B . (Интегрирование проводится только по области пространства, расположенной вправо от щелей.) Однако перед взаимодействием электрона с измерительным прибором можно

было бы наблюдать эффекты интерференции, которые для своего объяснения требуют, чтобы электрон, подобно волне, мог проходить одновременно через обе щели. Таким образом, если принять во внимание влияние измерительного прибора на волновую функцию, мы получаем эффективное превращение электрона из образования типа волны в образование типа частицы. Такое превращение было получено также в п. 2 в связи с мысленным опытом, в котором мы пытались наблюдать, через какую щель проходил электрон в процессе дифракции *).

Покажем теперь, как нарушение интерференционной картины приводит к последовательному объяснению того, что происходит с волновой функцией, когда наблюдатель смотрит на фотопластинку и определяет ту из щелей, через которую в действительности прошел электрон. Как мы видели, те же результаты для всех физических процессов можно предсказать и по волновой функции

$$\psi = \psi_A(x) e^{i\alpha_A} + \psi_B(x) e^{i\alpha_B}$$

и по волновой функции, которая равна либо *только* $\psi_A(x) e^{i\alpha_A}$, либо *только* $\psi_B(x) e^{i\alpha_B}$, но с соответствующими вероятностями P_A и P_B , что каждая из них действительно является правильной волновой функцией. Когда наблюдатель находит, через которую из щелей прошел электрон, он заменяет $\psi(x)$ или на $\psi_A(x) e^{i\alpha_A}$ или на $\psi_B(x) e^{i\alpha_B}$ в зависимости от результатов эксперимента. Таким образом, получается редукция волновой функции, о которой шла речь в начале п. 3. Вследствие нарушения интерференционной картины такая редукция соответствовала выбору только одной из двух возможных альтернатив для действительной волновой функции, а не каким-то реальным физическим изменениям в состоянии самого электрона.

Хотя разрушение определенных фазовых соотношений вытекает из основ квантовой теории (см. гл. 22), но мы хотим здесь показать, что этот результат существен для последовательной вероятностной трактовки волновой функции.

Предположим, что в мысленном опыте, описанном в п. 1, интерференция между $\psi_A(x)$ и $\psi_B(x)$ не была бы *полностью* нарушена действием измерительного прибора, применявшегося для обнаружения, через какую щель фактически прошел каждый электрон. Тогда, согласно этому предположению, на экране справа от щелей должны появиться интерференционные полосы. Но как только наблюдатель прибегает к помощи измерительного прибора (например, фотопластинки, на которой регистрируется изображение электрона в микро-

*) Заметим, что нарушение интерференции между волнами ψ_A и ψ_B приводит к исчезновению интерференционных полос, как это было описано в п. 2.

скопе), он может обнаружить, через какую щель прошел каждый электрон. Поскольку при этом можно показать, что каждый электрон несомненно прошел через определенную щель, то его последующее поведение не должно зависеть от того, была ли открыта другая щель в это время или нет. Поэтому вероятность появления данного электрона в какой-либо точке экрана должна быть пропорциональна одной из плотностей вероятности «отдельной щели», т. е. или $|\psi_A(\mathbf{x})|^2$, или $|\psi_B(\mathbf{x})|^2$, в зависимости от того, прошел ли этот электрон через щель A или щель B . Так как равновероятно, что данный электрон пройдет через любую щель, то, следовательно, после того как через систему пройдет много электронов, интенсивность полос на экране определяется суммой плотностей вероятностей отдельных щелей и не зависит от интерференционных членов $\psi_A^*(\mathbf{x})\psi_B(\mathbf{x}) + \psi_B^*(\mathbf{x})\psi_A(\mathbf{x})$. Таким образом, мы показали, что если наблюдатель пользуется фотопластинкой, то на экране не будет получено никаких интерференционных полос. Если интерференция между ψ_A и ψ_B была бы не *полностью* нарушена действием измерительного прибора, то мы пришли бы к теории, в которой статистически получающиеся полосы от электронов, попадающих на экран, должны были бы зависеть от того, взглянет или нет наблюдатель на регистрирующую часть измерительного прибора (в данном случае фотопластинку). Такая теория, очевидно, не имеет смысла. В итоге мы приходим к выводу, что полное нарушение интерференции между $\psi_A(\mathbf{x})$ и $\psi_B(\mathbf{x})$ необходимо для последовательной интерпретации $|\psi_A(\mathbf{x})|^2$ и $|\psi_B(\mathbf{x})|^2$ соответственно как вероятностей прохождения электрона или через щель A , или через щель B . Следовательно, для электрона, проходящего через систему щелей без взаимодействия с устройством, которое способно определить его положение, нельзя считать, что волновая функция претерпевает редукцию до значений $\psi_A(\mathbf{x})e^{i\alpha_A}$ или $\psi_B(\mathbf{x})e^{i\alpha_B}$, так как интерференция между этими функциями по-прежнему существует.

Резкие изменения математических величин, аналогичные описанной выше редукции волновой функции, часто встречаются и в классических вероятностных функциях всякий раз, когда получаются новые сведения. Так, на основе статистики страхований можно предсказать некоторую ожидаемую продолжительность жизни человека, о котором известно только, что ему больше 21 года. Пусть затем мы внезапно узнали, что ему в действительности 70 лет. С этого момента мы немедленно предскажем ему значительно более короткую продолжительность жизни. Внезапное изменение предсказываемой длительности жизни не вызвано изменением в состоянии человека, а лишь уточнением информации о нем. Резкие изменения такого рода допустимы, так как продолжительность жизни выражается только

с помощью табличных статистических данных и поэтому непосредственно не соответствует ее действительной длине у конкретного человека. Такую статистическую теорию можно противопоставить полной динамической теории, например классической механике, которая принципиально должна иметь возможность предсказать продолжительность жизни конкретного человека на основе движения всех составляющих его атомов и молекул. В теории такого типа динамические переменные должны быть в однозначном соответствии с описываемой ими системой. Поэтому с этими переменными не может произойти никаких изменений, если только последние не отражают соответствующих физических изменений в описываемой системе и просто являются уточнениями каких-либо сведений о ней.

Переменные в квантовой теории имеют некоторое сходство с классическими статистическими функциями типа ожидаемой продолжительности жизни, но, как будет видно, имеются весьма существенные различия между ними. Аналогия заключается в том, что волновая функция предсказывает только вероятности действительных событий, т. е. она не находится в однозначном соответствии с описываемой системой, как и классическая статистическая функция. Поэтому внезапная редукция волновой функции, наступающая, когда наблюдатель пользуется измерительным прибором (например, фотопластинкой), отражает не изменения в наблюдаемом объекте, а просто изменение статистической функции, дающей наблюдателю сведения об этой системе. С другой стороны, волновая функция весьма существенно отличается от классической вероятностной функции, поскольку до нарушения интерференции действием соответствующего измерительного прибора волновая функция не может быть последовательно выражена через простую вероятность. Это происходит потому, что фазовые соотношения между различными частями волновой функции, так же как и амплитуды, имеют физический смысл. Так, например, в мысленном опыте, где электрон проходит через систему двух щелей, фазовые соотношения между функциями $\psi_A(x)$ и $\psi_B(x)$ определяют интерференционные полосы, которые можно обнаружить на экране, расположенном вправо от щелей. Пока существуют определенные фазовые соотношения между $\psi_A(x)$ и $\psi_B(x)$, электрон способен проявлять интерференционные эффекты (действовать так, как будто он, подобно волне, проходит одновременно через обе щели). Поэтому внезапная редукция волновой функции в момент наблюдения представляет реальное изменение в физическом состоянии электрона (от поведения, подобного волне, к поведению, подобному частице). Как мы уже видели, интерпретация такого внезапного изменения волновой функции просто уточнением сведений наблюдателя об электро-не привела бы к бессмысленным результатам. И лишь после того, как определенные фазовые соотношения между $\psi_A(x)$ и $\psi_B(x)$ на-

рушены вследствие действия измерительного прибора, редукция волновой функции перестает отражать соответствующее физическое изменение в состоянии электрона. Это означает, что когда между $\psi_A(\mathbf{x})$ и $\psi_B(\mathbf{x})$ существует определенное фазовое соотношение, то волновая функция находится в большем соответствии с состоянием электрона, чем это было бы в случае простой классической функции, определяющей вероятность прохождения электрона через какую-нибудь из щелей. Несмотря на это, степень соответствия между волновой функцией и действительным поведением электрона всегда меньше, чем та, которая имеет место для динамических переменных классической механики. В пп. 9 и 13 мы увидим, что эта вспомогательная степень соответствия волновой функции с поведением электрона может быть положена в основу новой физической картины квантовой природы материи.

5. Обобщение предыдущих результатов. Обобщим теперь результаты п. 4 на случай произвольного измерения координаты. Для этого разделим пространство на области шириной Δx , как показано на рис. 21.

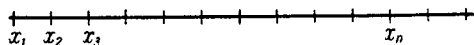


Рис. 21.

Предположим, что это разделение производится с помощью очень тонких проволочек, которые поглощают ничтожную часть падающей волны. Здесь, по существу, получается задача бесконечного числа щелей.

Обозначим волновую функцию в плоскости n -й щели через $\psi_n^0(\mathbf{x}_s)$. Эта функция равна нулю повсюду вне n -й щели, но внутри этой щели она равна $\psi(\mathbf{x}_s)$ — фактическому значению волновой функции в этой плоскости. Поэтому функция $\psi_n^0(\mathbf{x}_s)$ описывает состояние электрона, определенно проходящего через n -ю щель. Согласно принципу Гюйгенса, полная волновая функция в пространстве снизу от системы щелей равна

$$\psi(\mathbf{x}) = \int \frac{\exp [2\pi i (\mathbf{x} - \mathbf{x}_s)/\lambda]}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_s|} [\psi_1^0(\mathbf{x}_s) + \psi_2^0(\mathbf{x}_s) + \psi_3^0(\mathbf{x}_s) + \dots] d\mathbf{x}_s.$$

Короче можно написать

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_1(\mathbf{x}) + \psi_2(\mathbf{x}) + \psi_3(\mathbf{x}) + \dots,$$

где $\psi_n(\mathbf{x})$ представляет ту часть волновой функции в точке $\mathbf{x}$, которая пришла от n -й щели.

Написанные выше формулы дают волновую функцию системы, не возмущенной измерительным прибором. Если, однако, производят измерение положения достаточно точное, чтобы обнаружить, через какую щель прошел электрон, то процесс взаимодействия с измерительным

прибором изменяет волновую функцию, и она принимает вид

$$\psi(x) = \psi_1(x)e^{i\alpha_1} + \psi_2(x)e^{i\alpha_2} + \psi_3(x)e^{i\alpha_3} + \dots, \quad (6.4a)$$

где все постоянные фазовые факторы α являются различными непредсказываемыми и неконтролируемыми величинами *).

Обозначая через $P_n(x) = \psi_n^*(x)\psi_n(x)$ функцию распределения вероятности, имеющей место, когда открыта только n -я щель, для полной вероятности того, что частица достигнет данной точки, получаем

$$P(x) = |\psi(x)|^2 = \sum_n P_n(x) + \sum_{n \neq m} (e^{i(\alpha_n - \alpha_m)} \psi_m^* \psi_n + e^{i(\alpha_m - \alpha_n)} \psi_n^* \psi_m). \quad (6.4b)$$

Так как α_n и α_m представляют случайные фазы, то уничтожаются интерференционные члены (когда $m \neq n$) в среднем по ряду многих опытов. Таким образом, плотность вероятности сводится к сумме неинтерферирующих пакетов, которые можно, пока речь идет об их связи друг с другом, трактовать как классические вероятностные функции **). Это означает, что после того, как электрон провзаимодействовал с прибором, измеряющим его положение, все последующие процессы, претерпеваемые электроном, могут иметь вероятности, вычисленные или по волновой функции (6.4a), или при помощи эквивалентной процедуры, предполагая, что волновая функция *целиком* равна $\psi_1 e^{i\alpha_1}$, или $\psi_2 e^{i\alpha_2}$, или $\psi_3 e^{i\alpha_3}$ и т. д. с соответствующими вероятностями p_1 , p_2 , p_3 и т. д. Следовательно, электрон действует во всех отношениях подобно волне, которая прошла сквозь *одну* неизвестную щель ширины Δx . Чтобы найти, через какую щель электрон действительно прошел, надо прибегнуть к измерительному прибору. По состоянию системы перед измерением можно только предсказать вероятность обнаружения того или иного значения координаты.

Так как представление о волновой природе электрона было основано на его способности проявлять эффекты интерференции в больших областях пространства, то отсюда следует, что нарушение определенных фазовых соотношений, связанное с измерением положения, должно привести также к исчезновению всякой возможности обнаружить волновое поведение электрона на расстояниях, больших чем точность измерения Δx . Наоборот, электрон ведет себя скорее как частица, находящаяся в отдельной (но неизвестной) области шириной Δx . Однако опыты, в которых измеряются расстояния, меньшие чем Δx , должны обнаруживать эффекты интерференции и потому нуждаются по-прежнему в волновой интерпретации электрона. Резюмируя все вышеизложенное, можно сказать, что при взаимодействии

*) Как и в задаче двух щелей, изменения могут быть и более сложными, если процесс наблюдения положения изменяет также и само положение.

**) Заметим, что рассуждения здесь очень похожи на рассуждения в п. 4.

электрона с установкой, которая обнаруживает его положение, корпускулярные свойства электрона начинают превалировать над его волновыми свойствами, хотя электрон никогда не может быть отождествлен ни с частицей, ни с волной.

6. Измерение импульса. Примерно такие же результаты можно получить из анализа любого опыта по измерению импульса с точностью

$$\Delta p = h \Delta k.$$

Чтобы описать этот случай, рассмотрим компоненту Фурье $\varphi(k)$ волновой функции $\psi(x)$. Обозначим возможную область значений, которые могут быть найдены в результате измерения импульса, через $k_1, k_2, \dots, k_n, \dots$, как показано на рис. 22.

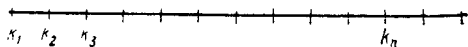


Рис. 22.

Если импульс системы лежит где-то в n -м интервале этих значений, то можно сказать, что система представлена соответствующим волновым пакетом в k -пространстве, этот пакет описывается функцией $\varphi_n(k)$. До наблюдения импульса волновую функцию можно записать в виде *)

$$\varphi(k) = \varphi_1(k) + \varphi_2(k) + \dots + \varphi_n(k) + \dots \quad (6.5)$$

Но после того, как электрон провзаимодействовал с измерительным прибором, способным определить его импульс, волновая функция принимает вид

$$\varphi(k) = \varphi_1(k) e^{i\alpha_1} + \varphi_2(k) e^{i\alpha_2} + \dots + \varphi_n(k) e^{i\alpha_n} + \dots, \quad (6.6)$$

где α_n — непредсказываемые и неконтролируемые фазовые факторы. Вероятность равна

$$P(k) = \sum_n |\varphi_n(k)|^2 + \sum_{m \neq n} \varphi_n^* \varphi_m e^{i(\alpha_m - \alpha_n)} + \varphi_m^* \varphi_n e^{i(\alpha_n - \alpha_m)}. \quad (6.7)$$

Как и в случае функции $P(x)$, интерференционные члены при усреднении уничтожаются, и получается сумма независимых вероятностей того, что импульс электрона имеет заданную, но неизвестно какую именно величину. Для нахождения этой величины необходимо, как и в случае измерения положения, обратиться к помощи специального измерительного прибора. Из состояния системы перед измерением

*) Здесь рассматривается одномерный случай. В трехмерном случае функции $\varphi_n(k)$ равны нулю повсюду, за исключением области, лежащей вблизи точки k_n . Эти функции не вполне аналогичны функциям $\psi_n(x)$ из п. 5, которые выводились из принципа Гюйгенса, примененного к распространению волны после ее прохождения через данную щель. В пространстве импульсов нет аналогичного распространения волн, подчиняющегося принципу Гюйгенса.

можно предсказать лишь вероятность любого заданного результата опыта.

Если электрон обладает достаточно определенным импульсом p , то его волновая функция должна соответственно обладать определенным волновым числом $k = p/\hbar$. Предположим, что импульс остается неопределенным с точностью Δp , тогда $\Delta k = \Delta p/\hbar$. Это означает, что даже если электрон первоначально был локализован в очень маленькой области, то после его взаимодействия с каким-нибудь прибором, измерившим его импульс с указанной точностью, волновая функция электрона должна расплыться и занимать область с минимальным размером порядка $\Delta x \cong 1/\Delta k = \hbar/\Delta p$. Причину такого расплывания легко выяснить, рассматривая неконтролируемые фазовые сдвиги. Так, до взаимодействия с прибором волновая функция была

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \sum_n \int \varphi_n(k) e^{ik(x-x_0)} dk = \sum_n U_n(x),$$

где каждая функция $U_n(x)$ представляет волновой пакет ширины $\Delta x \cong 1/\Delta k$. Единственный способ получить пакет более узкий, чем индивидуальные пакеты $U_n(x)$, заключается в нарушении интерференции между различными функциями $U_n(x)$ в точках, удаленных от центра пакета (см. гл. 3, п. 2). Но после взаимодействия с измерительным прибором получаем

$$\psi(x) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \sum_n e^{i\alpha_n} \int \varphi_n(k) e^{ik(x-x_0)} dk = \sum_n e^{i\alpha_n} U_n(x).$$

Вследствие появления контролируемых фазовых факторов нарушение интерференции между пакетами $U_n(x)$ не может длиться более продолжительное время, поэтому результирующий волновой пакет должен быть по крайней мере такой же ширины, как каждый из $U_n(x)$. Это означает, что волновая функция как целое превратилась в группу волновых пакетов с достаточно определенной длиной волны, которые перекрываются в пространстве координат, но не интерferируют. Система действует так, как если бы она обладала достаточно определенной, но неизвестной длиной волны (значение которой может быть получено с помощью измерительного прибора и соотношения де Бройля $\lambda = h/p$). Следовательно, для электрона, взаимодействующего с установкой, которая измеряет его импульс, волновые свойства (определенная длина волны) превалируют над корпускулярными свойствами (определенное положение). Примером такого измерения может служить взаимодействие электрона с кристаллом, которое допускает расплывание волновой функции электрона, и таким образом дает возможность получить определенную длину волны, по которой мы можем затем вычислить импульс (см. гл. 4, п. 8).

7. Связь изменений фазы с соотношением неопределенностей.

Интересно отметить, что нарушение интерференционной картины дает возможность просто объяснить происхождение соотношения неопределенностей. При измерении импульса мы видели, что нарушение определенных фазовых соотношений между частями волновой функции, достаточно далеко удаленными друг от друга в k -пространстве, мешает образованию узких пакетов в x -пространстве. Наоборот, разрушение интерференционной картины в широких областях x -пространства, которое происходит при точном измерении положения, мешает образованию узких пакетов в k -пространстве. Таким образом, все неопределенности, которые в гл. 5 мы приписывали передаче неконтролируемых квантов от измерительного прибора к наблюдаемой системе в процессе измерения, можно также приписать неконтролируемым изменениям фазы волновой функции. Но так как неконтролируемое изменение фазы и передача неконтролируемых квантов возникают в результате взаимодействия между измерительным прибором и наблюдаемой системой, в согласии с законами квантовой теории (см. гл. 22), то эти два метода трактовки задачи должны быть эквивалентными способами описания одного и того же явления. (Действительно, в гл. 8, п. 13 мы увидим, что трактовка микроявлений при помощи неконтролируемых квантовых переходов приводит к так называемому «каузальному» описанию; в то же время трактовка микроявлений при помощи неконтролируемых фазовых изменений волновой функции приводит к дополнительному «пространственно-временному» описанию процесса взаимодействия между двумя системами.)

8. Значение фазовых соотношений. Из предыдущего ясно, что фазовые соотношения между различными частями волновой функции столь же существенны, как и соотношения их амплитуд для определения физически важных результатов теории. Так, например, в координатном представлении фазовые соотношения между функциями $\psi(x)$ в различных точках пространства обуславливают распределение импульсов; а в импульсном представлении фазовые соотношения между функциями $\varphi(k)$ обуславливают распределение координат. Фазовые соотношения играют существенную роль даже в классическом предельном случае, ибо, как мы видели в гл. 3, п. 9, движение центра волнового пакета определяется изменением фазовых соотношений между различными функциями $\varphi(k)$. При детальном рассмотрении заметим, что центр пакета находится в той точке, где ряд функций $\varphi(k)$ стремится дать интерференционный максимум, в то время как на некотором расстоянии от этой точки они стремятся взаимно погасить друг друга и дать интерференционный минимум. Так как каждая функция $\varphi(k)$ колеблется, как $\exp(-i\hbar k^2 t/2m)$, то результирующее изменение фазы $\varphi(k)$ со временем изменяет положение интерференционных максимумов и минимумов, а следовательно, управляет

движением волнового пакета. Таким образом, классические уравнения движения содержатся в фазовых соотношениях между различными функциями $\varphi(k)$.

9. Квантовые свойства материи как возможность. На основе полученных до сих пор результатов можно показать, что квантовая теория приводит к новым представлениям о внутренних свойствах микрообъекта, которые заменяют классические представления. Согласно этим новым представлениям, внутренние свойства рассматриваются как вполне определенная возможность, проявление которой зависит в такой же мере от системы, с которой взаимодействует объект, как и от него самого. Чтобы пояснить эти представления, рассмотрим сначала электрон, волновая функция которого имеет вид широкого волнового пакета с определенным импульсом, а, следовательно, и определенной длиной волны. Такой электрон способен обнаружить свои волновые свойства при взаимодействии с подходящим измерительным прибором, например с кристаллической решеткой металла. Однако тот же самый электрон может проявить себя как нечто более напоминающее частицу, если он будет взаимодействовать с установкой, измеряющей положение, при этом его волновые свойства становятся соответственно менее существенны. Но даже проявляя себя более похожим на частицу, электрон в потенции способен опять показать свои волновые свойства в ущерб корпускулярным, если заставить его взаимодействовать с прибором, измеряющим импульс. Следовательно, электрон способен претерпевать непрерывные превращения от волнового представления к корпускулярному и обратно. На любой стадии этого процесса электрон может претерпевать дальнейшее превращение, при этом он или сохраняет первоначальное представление, или же получает противоположное. Тип измерительного прибора, с которым взаимодействует электрон, определяет, какой из этих возможных представлений превалирует.

Квантовые свойства электрона отличаются от свойств, описываемых классической теорией, не только своими скрытыми возможностями, но также и тем, что проявление этих возможностей нельзя вполне точно предсказать, зная состояние электрона перед тем, как он взаимодействовал с измерительными приборами. Рассмотрим, например, процесс, в котором электрон, описываемый первоначально волновой функцией в виде широкого волнового пакета, взаимодействует с установкой, которую можно использовать для измерения его положения. После взаимодействия волновая функция разбивается на независимые пакеты с определенными фазовыми соотношениями между ними, причем каждый из них имеет размер, по порядку величины равный ошибке измерений Δx . Но, как мы видели, электрон находится только в *одном* из этих пакетов, а волновая функция дает лишь *вероятность* того, что именно в данном пакете находится электрон. Следовательно, хотя общий характер проявления корпус-

кулярных свойств электрона определяется состоянием системы до взаимодействия, однако точные значения положения, которые он будет занимать, определены не полностью. Вместо этого будет существовать некоторая область, определяемая начальным распылением волнового пакета, внутри этой области будут беспорядочно флуктуировать фактические положения электронов при многократном повторении опыта, в котором начальные условия воспроизводятся с точностью, допускаемой квантовой природой материи (т. е. в пределах точности, устанавливаемой соотношением неопределенностей).

Вышеупомянутая интерпретация свойств электрона, как не вполне определенной возможности, находит свое математическое отражение в неполном определении самой волновой функции. До взаимодействия электрона с измерительным прибором волновая функция определяет два существенных типа вероятности: вероятность данного положения и вероятность данного импульса. Но сама по себе волновая функция не говорит нам, какая из этих двух несовместимых друг с другом вероятностных функций фактически реализуется. На этот вопрос можно ответить лишь после выяснения, с какой (измеряющей положение или импульс) установкой взаимодействовал электрон. Итак, хотя волновая функция действительно дает наиболее полное возможное описание электрона, которое может быть получено при помощи переменных, принадлежащих только самому электрону, но это описание неспособно определить, в какой форме (волны или частицы) проявляется электрон. Поэтому мы вновь вынуждены интерпретировать импульс и положение (а следовательно, волновые и корпускулярные свойства) как не вполне определенные возможности, скрытые в электроне и проявляющиеся более полно лишь при взаимодействии с соответствующим измерительным прибором *).

10. Рассмотрение более общих взаимодействий. До сих пор мы рассматривали только взаимодействия между электроном и измерительным прибором. Однако в гл. 22, п. 13 будет показано, что переходы от волновых к корпускулярным свойствам материи, подобные тем, которые описывались в п. 9, могут проявиться не только при взаимодействии с измерительными приборами, но также при взаимодействии с любой материальной системой независимо от того, является ли она или нет частью измерительной аппаратуры.

Это вполне естественное утверждение, ибо измерительный прибор есть не что иное, как обычное материальное тело, лишь выбранное таким образом, чтобы результаты взаимодействия с интересующей нас системой можно было объяснить достаточно просто и непосредственно. Если, например, электрон проявляется как волна в результате

*) Из этих рассуждений автора ясно видно, что в рамках современной квантовой механики мы изучаем такие объективные свойства материи, коренными определяющими связями для которых являются связи и отношения между микрос объектами и их классическим макрокруглением. — *Прим. ред.*

взаимодействия с кристаллической решеткой металла, представляющей собой часть лабораторной установки, то то же самое произойдет с ним, если он взаимодействует с такой же решеткой на дне моря или в межзвездном пространстве. Точно так же, если электрон проявляет свои корпускулярные свойства при взаимодействии с квантом короткой длины волны, например в микроскопе, то его поведение будет таким же, если квант генерируется в каком-то самопроизвольном процессе без вмешательства человека.

11. О реальности волновых свойств материи. Основная мысль, к которой мы пришли в этой главе, заключается в том, что волновые свойства материи столь же реальны, как и ее корпускулярные свойства. Но мы настолько привыкли мыслить классическими понятиями, что всегда возникает почти непреодолимое стремление вернуться к прежним представлениям и предположить, что электрон в действительности является частицей, имеющей определенную координату и импульс, которых нельзя одновременно измерить. Мы стремимся таким образом лишить физической реальности волновые свойства материи, которые проявляются в важных фазовых соотношениях при определении интерференции.

Поскольку эти классические представления весьма стойкие, то целесообразно дать здесь несколько дополнительных доводов, которые показали бы, что они приводят к серьезным противоречиям. В наиболее последовательной форме эти представления можно сформулировать так: электрон представляет собой материальное образование, обладающее определенной координатой и определенным импульсом, которые не могут быть измерены одновременно точнее, чем это допускается соотношением неопределенностей. Появление энергетических уровней в атомах следует объяснить по теории Бора — Зоммерфельда или с помощью какой-то более точной теории, которая может дать лучшее согласие с опытом. Дифракцию электронов можно объяснить так, как это было сделано Дьюэном (гл. 3, п. 12), который считал, что появление определенных углов рассеяния является результатом квантованных передач импульса между электроном и решеткой. Хотя Дьюэн разработал свое доказательство только для систем с периодической структурой типа кристаллической решетки, но существуют различные способы обобщения этого метода и на аperiодические структуры, такие, как система двух щелей и электронная линза.

Мы не будем обсуждать здесь детально какую-либо из этих возможностей, а лишь отметим, что можно развить правдоподобные теории, в которых допустимые величины передаваемых импульсов зависят от размеров и формы системы, числа отверстий и т. д., и, таким образом, получить эффекты, которые будут весьма похожи на явления, предсказываемые волновой теорией дифракции электронов.

В любом опыте по дифракции (как указывалось в п. 1) электроны или фотоны могут проходить по одному, причем интервалы между этими прохождениями можно сделать настолько большими, чтобы полностью исключить возможное влияние частиц друг на друга *). Тогда для объяснения возникновения в статистических опытах интерференционных полос (появляющихся, как известно, после того, как много частиц достигнет индикатора) при помощи модели частиц с неопределенными координатой и импульсом мы можем предположить, что вероятная область углов рассеяния частицы определяется ограничениями (типа тех, которые ввел Дьюэн) на квантовые условия передачи импульсов между частицей и системой щелей. Однако такие ограничения могут зависеть самое большее от размеров и формы апертуры и от *фактических* координаты и скорости, с которыми частица попадает в систему.

На основе этого предположения рассмотрим опыт, в котором определяется положение электронов при помощи протонного микроскопа (детальнее см. гл. 5, п. 12). Предполагается, что электроны вначале покоятся и обладают точно определенным импульсом и что имеется параллельный пучок протонов также с точно определенным импульсом p , падающий на микроскоп, как показано на рис. 23. Положение электрона делается видимым, если он рассеет протон, который затем попадает в какую-то часть изображения.

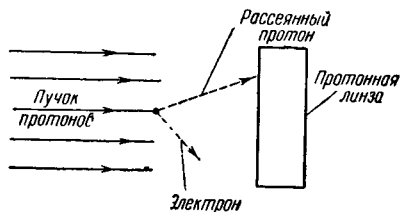


Рис. 23.

Если бы протоны были простыми частицами, то области неконтролируемых квантовых отклонений, которые они могли бы испытать от краев линзы, должны были бы определяться только размерами и формой линзы, положением и скоростью протона, когда он попадает на линзу. Однако из рассмотрения опытов по дифракции частиц (протонов и электронов) следует, что детали этого явления не зависят существенным образом от координаты и скорости частицы. Другими словами, независимо от первоначального направления или положения частиц *область* величин передаваемых импульсов оказывается почти одинаковой. Это доказывается, например, тем фактом, что наблюдаемая разрешающая способность электронной или протонной линзы очень слабо зависит от направления падающих частиц или от положения наблюдаемого предмета. Следовательно, можно сказать, что область неконтролируемых отклонений должна определяться главным образом размерами и формой линзы. Поскольку от рассматриваемой

) Как уже упоминалось, такие опыты были фактически проведены Биберманом, Сушкиным и Фабрикантом в 1949 г. [82]. — *Прим. ред.*

теории можно добиться практически тех же самых результатов, что и от волновой теории, то разрешающая способность линзы должна быть порядка $\lambda/\sin \varphi_0$, где φ_0 — апертура линзы, а λ — длина волны де Бройля для протона. Если положить $\varphi_0 = \pi/2$, то для величины неопределенности в определении координаты электрона получим

$$\Delta x \cong \lambda \cong \frac{\hbar}{p}.$$

Однако в силу закона сохранения импульса известно, что электрон не может получить от протона импульс больше величины порядка $\frac{m}{M} p$, где m — масса электрона, а M — масса протона. Так как начальное значение импульса электрона было известно с большой точностью, то получаем

$$\Delta p \cong \frac{m}{M} p \quad \text{и} \quad \Delta x \Delta p \cong \frac{m}{M} \hbar,$$

что намного меньше, чем минимум, допускаемый соотношением неопределенностей. Но мы видели выше (гл. 5, п. 16), что противоречие с соотношением неопределенностей в каком-либо пункте уже делает несостоятельным все представление о корпускулярно-волновом дуализме. Например, в данном случае оказывается возможным определить импульс электрона точнее, чем определяется волновой вектор $\mathbf{k}$ в его волновом пакете, а это приводит к противоречию с соотношением де Бройля.

Пользуясь трактовкой, данной в гл. 5, п. 12 в связи с аналогичной задачей, можно избежать этой трудности, предположив, однако, что за время между моментом рассеяния и моментом попадания на фотопластинку протон вел себя во всех отношениях подобно волне, выходящей из точки рассеяния. Поскольку протону могут быть переданы лишь небольшие значения импульса ($\Delta p \cong \frac{m}{M} p$), протонной волне должен соответствовать небольшой интервал волновых векторов, т. е. она действует подобно узкому оптическому пучку лучей *). Поэтому разрешающая способность определяется не размерами линзы, а неизбежной дифракцией вследствие угловой ширины (небольшой) пучка лучей

$$\Delta \theta \cong \frac{\Delta p}{p} \cong \frac{m}{M}.$$

*) Такое поведение может служить примером взаимного превращения волновых и корпускулярных свойств материи. При распространении от точки рассеяния до точки проявления на пластинке протон действует подобно волне, но при взаимодействии с экраном он превращается в объект, подобный частице.

Следовательно, разрешающая способность линзы равна только

$$\Delta x \cong \frac{\lambda}{\Delta \theta} \cong \frac{h}{p} \frac{M}{m},$$

и мы получаем, что $\Delta x \Delta p \cong h$ в согласии с соотношением неопределенностей.

Для сохранения модели частицы с неопределенной координатой и импульсом следовало бы предположить, что допустимая область импульсов, передаваемых от частицы к линзе, определяется областью импульсов (обратной величиной), передаваемых от электрона к протону. Таким образом, протон, взаимодействуя с линзой, как бы должен «помнить», что он перед этим взаимодействовал с электроном. Если он перед этим взаимодействовал не с электроном, а с протоном, то его поведение должно быть другим.

Ясно, что для сохранения модели частицы *) в этом опыте мы должны допустить сложные, искусственные и неправдоподобные предположения. Сомнительно, чтобы удалось сделать такие предположения внутренне непротиворечивыми, но еще сомнительнее, что они не будут противоречить всем известным фактам о свойствах материи. С другой стороны, волновая теория, которая уже правильно объяснила так много других опытных фактов, позволяет решить эту задачу простым и естественным путем, не приводящим ни к каким противоречиям. Таким образом, можно заключить, что волновые свойства материи столь же реальны, как и ее корпускулярные свойства, и поэтому для получения полной и последовательной теории мы должны рассматривать обе эти группы свойств, пользуясь каждой из них при соответствующих условиях. Тем самым вывод, приведенный в п. 1, о том, что индивидуальному электрону следует приписать некоторые волновые свойства, получает более полное обоснование. (Качественная картина связи между волновыми и корпускулярными свойствами приводится в п. 12.)

12. Волномеханическое объяснение следов в камере Вильсона. Представляет интерес воспользоваться волновыми и корпускулярными представлениями для объяснения типичного эксперимента, например, для объяснения возникновения следа (трека) частицы в камере Вильсона. (Эта задача уже частично рассматривалась в п. 2.) Так как частица проходит вблизи атомов газа, то она их возбуждает (или ионизирует), оставляя вдоль своей траектории след возбужденных атомов и ионов. При расширении газа эти ионы служат центрами конденсации водяных капель, которые и делают видимым путь частицы.

Как можно объяснить это явление с помощью волновой теории? Известно, что атом возбуждается или ионизируется, так как

*) Понимая под частицей опять-таки ее классическое представление. — Прим. ред.

заряженная частица, пролетая мимо, передает атому квант энергии. Поскольку маловероятна ионизация атома, когда заряженная частица пролетает от него на расстояниях, больших чем несколько атомных диаметров, то можно считать, что наблюдение капелек, возникших на ионах, принципиально дает возможность определить путь, проходимый частицей с точностью порядка нескольких атомных диаметров. При используемых давлениях газа в камере частица, попадая в нее, практически столкнется с каким-нибудь атомом уже на очень коротком расстоянии порядка 10^{-5} см. Следовательно, когда электронный волновой пакет попадает в камеру, то он быстро разбивается на независимые пакеты, не имеющие определенных фазовых соотношений между собой, причем размеры каждого пакета будут порядка нескольких атомных диаметров. Как было показано в пп. 3 и 5, электрон находится только в *одном* из этих пакетов, а волновая функция представляет собой лишь *вероятность* того, что электрон находится в данном пакете. Каждый из этих пакетов может служить возможной исходной точкой для новой траектории, но каждую из этих исходных точек надо рассматривать как отдельную и независимую возможность, которая при своем осуществлении исключает все остальные.

Если первоначальный импульс частицы был очень велик, то неопределенность в импульсе, возникающая в результате взаимодействия с атомом, приведет лишь к небольшому отклонению; поэтому все неинтерферирующие пакеты будут двигаться почти с той же скоростью по величине и направлению, что и пакет падающей частицы. По мере движения каждый пакет начинает расплываться, и волновые свойства электрона начинают превалировать над его корпускулярными характеристиками. Однако, прежде чем пакет сумеет очень сильно

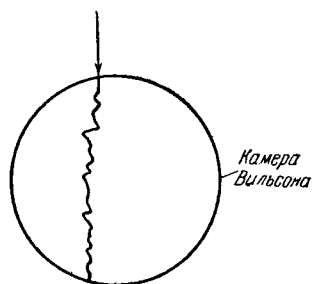


Рис. 24.

расплываться, он окажется вблизи другого атома и опять разобьется на неинтерферирующие пакеты, каждый из которых представляет собой отдельную и независимую возможность локализации объекта в виде частицы. Осуществление любой из этих возможностей исключает все остальные. Таким образом, процесс непрерывного взаимодействия с атомами газа мешает беспрепятственному проявлению волновых свойств падающей «частицы».

Истинная траектория, полученная по наблюдениям треков ионов, подобна кривой, изображенной на рис. 24. Она состоит из множества мелких отклонений, возникающих всякий раз, когда пакет находится вблизи атома. Эти отклонения надо понимать как рассеяние частицы атомами. Так как нельзя точно предсказать, где пакет столкнется с атомом, или какой импульс будет передан атому, то нельзя ука-

зать и точную форму пути. Но если скорость частицы достаточно велика, то появление больших отклонений маловероятно, и поэтому траектория будет близка к прямой линии. В противном случае траектория может иметь резкие случайные отклонения от прямой.

Если сравнить это описание с классическим представлением, что через камеру проходит частица, то получается по существу тот же результат. Классически также предсказываются отклонения частицы, величина и распределение которых должны, в принципе, точно определяться расположением каждого атома относительно пролетающей частицы. Но так как практически определить эти положения атомов невозможно, то получается ряд случайных отклонений.

Таким образом, можно объяснить наблюдаемые следы частиц в камере Вильсона с помощью волновой функции, используя ее вероятностную трактовку. Все данные, доказывающие корпускулярную природу материи, получаются из опытов такого типа, в которых траектория определится путем последовательных измерений координат. Но мы видели, что квантовая теория предсказывает, что проявление корпускулярных свойств электрона, при котором он ведет себя как частица, имеет место лишь при непрерывном взаимодействии с прибором, измеряющим его положение (в данном случае этим прибором являются атомы, которые позже становятся центрами водяных капелек), что препятствует проявлению волновых свойств электрона. До тех пор, пока измерения положения не изменяют заметным образом импульса, система ведет себя так, как будто она обладает непрерывной и достаточно точно определенной траекторией. Но если приблизиться к квантовым пределам точности, то неконтролируемые отклонения, возникающие при взаимодействиях с атомами газа, не позволяют говорить о непрерывной и динамически определенной траектории частицы. Если, например, интересоваться точным описанием движения каждого электрона при его рассеянии атомом газа, то волновые свойства электрона становятся весьма существенными (см., например, гл. 21).

Таким образом, мы приходим к выводу, что квантовая трактовка связи волновых и корпускулярных свойств материи позволяет объяснить все материальные явления.

13. Качественная картина квантовых свойств материи. Все вышеизложенное в настоящей главе позволяет дать предварительную качественную картину квантовой природы материи.

Наиболее важным новым представлением, к которому мы пришли, является представление о том, что любое материальное тело (например, электрон) нельзя полностью отождествить ни с частицей, ни с волной; оно лишь обладает некоторыми возможностями для проявления одной из этих форм за счет другой. Какая из этих противоположных возможностей проявления электрона будет в действительности реализована в каждом данном случае, зависит в равной

мере как от свойств той системы, с которой взаимодействует электрон, так и от самого электрона. Так как электрон непрерывно взаимодействует со многими системами различных типов, каждая из которых проявляет его различные возможности, то электрон будет претерпевать непрерывные превращения между своими различными возможными формами поведения (т. е. волной и частицей)*).

Однако точный ход этих превращений связан с состоянием системы перед взаимодействием не динамически, а лишь статистически. Конечно, в классическом предельном случае эффектами этих превращений можно пренебречь, потому что волновые свойства электрона в этих условиях имеют исчезающе малое влияние. Точно так же в классическом пределе можно пренебречь корпускулярными свойствами для электромагнитных полей. Этим объясняется тот факт, что в классическом случае каждый тип системы обладает определенными «внутренними» свойствами (они всегда или корпускулярные, или волновые).

Следует предостеречь от предположения, что электрон является сложным материальным образованием, состоящим из многих составных частей, которые как-то могут перестраиваться под влиянием различных сил, действующих со стороны окружающей среды и превращающих электрон из образования, обладающего волновыми свойствами, в образование с корпускулярными свойствами. Такая картина была бы по существу эквивалентна предположению о существовании скрытых параметров (в данном случае этими параметрами являются положения различных «частей»), которые определяют поведение электрона в целом. Но, как мы уже видели (гл. 5, пп. 3 и 17), такое предположение о скрытых параметрах нельзя согласовать с современной формулировкой квантовой теории. Превращения электрона из волнового в корпускулярное образование и наоборот, которые предсказываются квантовой теорией, относятся к фундаментальным, но далее не анализируемым изменениям того, что в классической теории называлось «внутренней» структурой электрона. Действительно, квантовая теория требует, чтобы мы совсем отказались от представления, что электрон, или какое-нибудь другое материальное образование, обладает какими-то внутренними свойствами. Наоборот, нужно считать, что каждый объект представляет собой нечто, обладающее лишь не полностью определенными возможностями, которые проявляются при взаимодействии объекта с соответствующей системой.

Эти выводы противоречат представлениям, которые долгое время господствовали как в физике, так и в большинстве других областей

*) Вспомним в этой связи результаты п. 10, а именно, что переход от волновой к корпускулярной форме материи не ограничивается взаимодействием с измерительным прибором, а наблюдается при любых материальных взаимодействиях.

науки: а именно, что вселенную следует рассматривать состоящей из независимых и отдельных частей, которые взаимодействуют по точным динамическим законам и тем самым образуют одно целое. В квантовой теории мы видели, что ни одного свойства этих «частей» нельзя определить вне взаимодействия с другими частями, и, более того, различные типы взаимодействий проявляют различные «внутренние» свойства этих так называемых «частей». Поэтому, по-видимому, необходимо отказаться от представления, что вселенную можно фактически разбить на отдельные части, и заменить это представлением о всем мире как едином целом. Только в классическом пределе можно без всяких оговорок правильно пользоваться представлением о вселенной, состоящей из отдельных частей. Повсюду, где квантовые явления играют существенную роль, мы найдем, что отдельные «части» вселенной могут существенно изменяться с течением времени вследствие неизбежных и неразделимых *связей*, существующих между ними. Таким образом, мы приходим к картине вселенной как неделимого, но гибкого и постоянно изменяющегося целого *).

В гл. 8 и 22 мы дадим дальнейшее уточнение качественного описания квантовой природы материи. Читателю полезно будет после прочтения этих глав опять вернуться к данной главе для лучшего усвоения всех введенных здесь новых представлений.

*) Здесь автор дает правильное диалектико-материалистическое определение единства материального мира. — *Прим. ред.*

СВОДКА ОСНОВНЫХ КВАНТОВЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

В гл. 1—6 мы прошли длинный путь, начиная с описания гипотезы Планка о дискретных энергетических состояниях ($E = nh\nu$) осциллирующего поля излучения. Хотя эта гипотеза полностью противоречит всей классической физике, но она дает количественное объяснение распределению энергии в спектре электромагнитного излучения, испускаемого абсолютно черным телом, которое прекрасно согласуется с опытами для всех изученных областей температур и частот. Из того простого факта, что квантованные осцилляторы излучения должны находиться в термодинамическом равновесии с осцилляторами вещества стенок сосуда, в котором заключено поле излучения, мы приходим к выводу, что энергия осциллятора вещества квантуется таким же образом. Эйнштейн и Дебай дали правильное количественное объяснение удельных теплоемкостей большого числа твердых тел, применяя это представление к колебаниям атомов, образующих твердое тело.

Следующий этап развития квантовой теории заключался в приращении представления о квантовании энергии осциллятора излучения к явлению обмена энергией между электромагнитными полями и заряженными частицами, например электронами. Это представление требует, чтобы такие обмены осуществлялись квантами с энергией $E = h\nu$. Это в точности совпадает с тем, что наблюдается в фотоэлектрическом эффекте. С другой стороны, была ясно показана несостоятельность классической теории, требующей непрерывной передачи энергии. Из того, что энергия осцилляторов есть величина, кратная определенной единице, следует, что передача энергии электрону должна быть неделимой, так как в противном случае должно было бы существовать промежуточное состояние, в котором у осциллятора была бы часть кванта. Множество опытов, в том числе фотоэлектрический эффект, эффект Комптона и другие, подтвердили неделимость всех квантовых процессов.

В силу того, что энергия осциллятора излучения может переходить к электрону только квантами, электромагнитная волна приобретает много корпускулярных свойств. В частности, внезапная ло-

кализация всей энергии волны в одной точке указывает на то, что свет состоит из частиц. Однако, даже если присутствует только один фотон, свет обнаруживает явление интерференции, что столь же убедительно доказывает, что свет обладает волновыми свойствами. Здесь мы впервые встретились с корпускулярно-волновым дуализмом, характеризующим все материальные системы в квантовой теории. При определенных условиях свет обнаруживает явления интерференции и ведет себя весьма похоже на волну, в то время как при других условиях он действует как частица. Эти две формы связываются тем, что интенсивность волны определяет вероятность сосредоточения всей энергии в одной точке, как если бы система представляла собой частицу. Таким образом, мы видим, как связаны воедино вероятность, корпускулярно-волновой дуализм и дискретность квантовых переходов.

Затем был поставлен вопрос, почему в макроскопических масштабах кажутся справедливыми непрерывные динамические законы классической физики, в то время как элементарные атомные процессы оказываются дискретными и определяются только их вероятности. Ответ на этот вопрос дает принцип соответствия, в котором указывается, во первых, что дискретность атомных процессов слишком мала для ее регистрации в явлениях классических макроскопических масштабов и, во-вторых, что любой классический процесс представляет собой такую большую совокупность квантовых процессов, в которой отклонение действительного результата от его статистического среднего ничтожно мало. Для того чтобы квантовые законы перешли в правильные классические законы, необходимо строго ограничить и возможную локализацию квантовых состояний и вероятности квантовых процессов. Например, при помощи принципа соответствия мы получили условия Бора — Зоммерфельда для квантования действия. Эти условия приводят затем к ряду предсказаний, подтверждаемых экспериментами. Аналогично вероятность излучения может быть приближенно предсказана из требования, что она должна приводить к правильной классической скорости излучения в соответствующем пределе.

Однако теория все еще имела три существенных недостатка: 1) применялась только к периодическим движениям, 2) не учитывала того, что происходит при переходе от одного энергетического уровня к другому, 3) была неприменима к сложным атомам. Все эти дефекты были окончательно устранены волновой теорией де Бройля и Шрёдингера. Квантование действия естественно вытекает из граничных условий для волн в периодических системах. Аперiodические системы описываются при помощи волновых пакетов, которые движутся со скоростью, равной скорости классических частиц на их траекториях. Переходы между орбитами описываются как непрерывный волновой поток от одной орбиты к соседней. Наконец,

позже мы увидим, что с помощью уравнения Шрёдингера можно описать все системы, сколь бы они ни были сложны, и получить количественно правильные результаты для огромного числа приложений в спектроскопии, химии, теории твердых тел, электропроводности, рентгеновских лучах и теории атома. Во всех этих областях физики классическая физика приводит к неразрешимым трудностям, в то время как квантовая физика дает правильные результаты.

Хотя применение волновой теории оказалось весьма успешным, но в связи с ним возникло несколько парадоксов. Волновая теория хорошо объясняет интерференционные явления типа эффектов, наблюдавшихся в опытах Дэвиссона — Джермера. Но даже после того, как электрон или электромагнитная волна явно претерпели дифракцию, всегда возможно обнаружить электрон или фотон в какой-то определенной точке пространства. Точно так же, хотя имеется непрерывный волновой поток от одной орбиты к другой, но процесс передачи энергии по-прежнему неделим, так как опыт показывает, что атом или поглощает всю энергию кванта, или ничего не поглощает. Если вспомнить, что квантовые законы известны только как законы вероятностные, то наиболее естественное объяснение этих результатов сводится к тому, что волна дает вероятность обнаружить частицы в данной области пространства. Интенсивность данной составляющей Фурье $|\varphi(\mathbf{k})|^2$ представляет собой лишь вероятность того, что импульс имеет значение $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$; это можно показать подобным же образом. Следовательно, материя при различных условиях ведет себя или как волна, или как частица, т. е. обнаруживает корпускулярно-волновой дуализм своих свойств.

Связь интенсивности волны и вероятности, с одной стороны, в комбинации со связью между длиной волны и импульсом, с другой, приводит к соотношению неопределенностей, которое является одним из самых важных результатов корпускулярно-волнового дуализма. Это соотношение неопределенностей наиболее точно указывает границы применимости классических динамических представлений без помощи волновой картины. Наконец, мы видели, что в любом фактическом процессе измерения всегда имеется стадия, связанная с неконтролируемой и непредсказываемой передачей неделимого кванта, которая не дает возможности сделать выводы относительно состояния наблюдаемой системы, точнее, тех ограничений, которые накладываются соотношением неопределенностей. Так как соотношение неопределенностей, вытекающее из корпускулярно-волнового дуализма, требует для своего подтверждения еще двух моментов — дискретности квантовых переходов и неполной предсказуемости того, когда и где этот переход осуществляется, то можно заключить, что все эти три составных элемента следует объединить для построения последовательной квантовой теории. Таким образом, квантовая теория обладает очень совершенным внутренним единством,

при котором каждая ее отдельная часть неразрывно связана с другими и вся теория рушится, если удалить одну из ее частей.

Наконец, мы видели, что даже волновая функция испытывает скачкообразные и неконтролируемые изменения, когда наблюдаемый объект взаимодействует с измерительной аппаратурой. Такое поведение волновой функции приводит к качественному описанию свойств материи при помощи не полностью определенных и взаимно несовместимых возможностей, которые могут полнее проявиться лишь при взаимодействии с соответствующей системой материального окружения. Например, проявит ли электрон больше волновых или корпускулярных свойств, будет зависеть от того, взаимодействует ли он с чем-то, что способствует проявлению его волновых или корпускулярных свойств. Таким образом, мы вынуждены рассматривать материю как нечто более текучее и зависящее от окружающей обстановки, чем это предполагалось в классической физике.

Дальнейшее развитие этих новых представлений о структуре материи будет изложено в гл. 8 и 22.

ПОПЫТКА ПОСТРОЕНИЯ ФИЗИЧЕСКОЙ КАРТИНЫ КВАНТОВОЙ ПРИРОДЫ МАТЕРИИ

1. Необходимость введения новых представлений*). Выше мы проследили шаг за шагом отдельные звенья рассуждений, которые привели нас от классической к квантовой физике. Таким образом, была построена теория, которая находится в прекрасном количественном согласии с огромной совокупностью опытных фактов, многие из которых находились в противоречии даже с качественными предсказаниями классической теории. Однако эта новая теория представляет собой не только далекоидущие изменения в содержании научных знаний, но также содержит и более радикальные изменения в основных представлениях, с помощью которых эти знания должны быть выражены. Перечислим три важнейших отличия новой теории от старой:

1) Представление о непрерывной траектории заменяется представлением о дискретных переходах.

2) Классическое динамическое представление о причинности заменяется понятием статистической причинности.

3) Представление о том, что материю возможно представить в виде совокупности отдельных независимых частей, обладающих определенной «внутренней» структурой (например, волна или частица), заменяется представлением о том, что вселенная является неделимым целым, отдельные части которого имеют смысл абстракций или приближений, справедливых лишь в классическом пределе.

Поскольку большинство опытов до последнего времени проводилось в области явлений, которые с достаточной степенью приближения описываются при помощи классических понятий, то новые квантовые представления для нас непривычны. В этой главе мы попытаемся сделать эти новые представления более привычными и показать, что они, по крайней мере в основном, столь же обоснованы, как и понятия классической теории. При этом мы изберем следующий

*) Многие представления, изложенные в этой главе, являются обработкой содержания лекций Н. Бора [1].

путь рассуждений: критически рассмотрим классические понятия непрерывности и динамической причинности и покажем, что нет логических причин, чтобы их принять. Покажем также, что квантовые представления о дискретности и статистической причинности не только полностью самосогласованы с логической точки зрения, но и значительно ближе к некоторым наивным представлениям, возникающим на многих фазах обычных опытов. Затем придем к принципу дополненности Бора, который явился первым качественным обоснованием новых представлений, необходимым для понимания квантовых свойств вещества. После этого критически обсудим классические представления о возможности исследования системы путем разложения ее на составные части и синтеза этих частей, согласно точным динамически причинным законам, и покажем, что такая процедура в области квантовых явлений недопустима. Таким образом, мы вынуждены будем описывать вселенную как единое целое. Наконец мы рассмотрим некоторые аналогии квантовых понятий, которые должны будут помочь читателю составить более наглядное представление о круге вопросов, охватываемых квантовой теорией.

2. Анализ понятия непрерывности. Начнем с проблемы непрерывности движения частиц в классической физике. Основными параметрами, описывающими классическую элементарную частицу, являются ее координата и скорость (или импульс), причем предполагается, что в каждый момент оба эти параметра имеют определенные значения, непрерывно изменяющиеся со временем. Начнем с самых простейших представлений об этом, а позже перейдем к более сложным теориям непрерывности и к использованию производных при описании скорости частицы.

3. Простое и наглядное описание непрерывного движения. Простейшие представления о местоположении предмета подразумевают, что предмет в определенном положении неподвижен. Это значит, что если пытаться изобразить положение предмета с *идеальной* точностью, то необходимо представить себе предмет, который занимает одно зафиксированное положение и никакого другого. Можно представить движение как последовательность предметов с несколько отличными координатами, как это бывает в движущихся картинах, но последовательность зафиксированных положений не включает все свойства, обычно ассоциируемые с движением. В частности, такое представление не включает понятия, что реально движущийся предмет *непрерывно* проходит некоторое пространство с течением времени. Для описания истинного процесса движения, протекающего непрерывно, необходимо представить себе предмет проходящим за определенный промежуток времени определенное пространство. Можно уменьшить промежуток времени до очень малой величины и соответственно уменьшить неопределенность положения. Но нельзя уменьшить эту неопределенность до нуля и при этом получить картину

движущегося предмета, поскольку при изображении предмета в абсолютно определенной точке пространства нельзя избежать того, чтобы не представить предмет неподвижным. Другими словами, нельзя одновременно думать о координате предмета и об его скорости.

Можно спорить о том, что можно определить непрерывную траекторию движущегося предмета и что в каждый момент времени он занимает определенное положение. Так ли это или нет, мы разберем позже, но здесь лишь укажем, что такая процедура просто определяет некоторые результаты движения, после того, как оно уже имело место. Описание предмета в процессе движения при этом не дается. Для получения такого описания необходимо несколько затуманить наше представление о положении. Например, смазанная фотография быстро движущейся кареты показывает, что карета движется, так как она дает непрерывное покрытие пространства за некоторый период времени. С другой стороны, резкое изображение движущейся кареты, полученное с очень маленькой выдержкой, не доказывает нам ее движения. Такие следы неопределенности нашего изображения движущегося предмета подтверждают, что мы действительно думаем о предмете в стадии перехода из одного положения в другое. Когда предмет находится в таком переходном состоянии, то изображение не дает нам точного представления, где он находится, а только как изменяется его среднее положение со временем. Именно в этом понятии движения заключается мысль, что непрерывно движущийся предмет имеет несколько неопределенную область своего положения.

4. Аналогия простых и квантовых представлений о движении. Простая картина движения имеет много общего с представлением, вводимым квантовой теорией, хотя, конечно, они и не вполне одинаковы. Согласно квантовой теории, импульс, а следовательно, и скорость имеют определенный смысл только, если есть предпосылки для существования волновой структуры в пространстве. Если такие предпосылки имеются, то волновой пакет (см. гл. 3, п. 2) находится в состоянии движения в пространстве, причем его среднее положение перемещается от одной точки к другой с достаточно определенной скоростью. Но движение волнового пакета аналогично нашей простой картине движущейся частицы, так как в обоих случаях мы представляем себе, что частица занимает в некоторый момент интервал положений, в то время как среднее положение изменяется со временем непрерывно. Таким образом, квантовая теория дает изображение процесса движения, которое значительно ближе к нашим простейшим представлениям, чем это дает классическая теория. Мы не можем представить себе частицу, имеющую одновременно определенные импульс и координату. Квантовая теория показала, что нет необходимости пытаться это сделать, так как таких частиц не существует.

5. Аналогия простых и квантовых представлений о фиксированном положении. Чем же отличается наше наивное представление о движении от квантовых представлений? Согласно простейшим представлениям, возможно иметь покоящийся предмет, т. е. предмет в зафиксированном положении, в то время как соотношение неопределенностей гласит, что предмет с точно определенным положением имеет совершенно неопределенный импульс. Однако тщательное изучение показывает, что такая точка зрения в действительности близка к нашей простой картине. Можно сказать, что если мы представляем предмет в данном положении, то мы просто не можем в то же самое время думать об его скорости.

Итак, если мы отказываемся от возможности представить себе движение предмета непрерывным, то можно начать с изображения его в определенном положении, а затем вообразить, что через короткое, но конечное время он находится где-то еще. Где именно, мы не можем решить, пользуясь нашей первоначальной картиной, любое положение оказывается равновозможным. А это значит, что любая скорость тоже равновозможна в нашей картине точно локализованной частицы. Такое представление весьма близко к квантотеоретическому описанию. Чем точнее локализован волновой пакет, тем быстрее он расплывается и тем меньше возможностей для приближенного непрерывного описания движения. Таким образом, наши наивные представления и квантовая теория имеют некоторую аналогию, а именно возможно дать непрерывное описание движения, если только положение смазано или сделано неопределенным, и возможно дать описание частицы в определенном положении, если только отказаться от возможности описать ее в непрерывном движении.

Хотя наше наивное и квантотеоретическое представления очень напоминают друг друга, но не следует делать вывод, что квантовая теория *идентична* наивному представлению. Мы просто подчеркиваем близкую описательную аналогию там, где оба представления касаются проблемы движения.

6. Более сложные представления, включающие понятие непрерывной траектории. Может возникнуть возражение, что наши простые представления чересчур наивны, чтобы к ним можно было отнестись серьезно. Тогда нас вместо этого может больше удовлетворить описание движения при помощи непрерывной траектории, для которой координата в каждый момент времени может быть определена с любой точностью. Мы не можем непосредственно изобразить процесс движения, это можно было бы сделать, лишь введя понятие производной. Для этого рассмотрим малый интервал времени Δt и определим расстояние Δx , проходимое за это время. Тогда средняя скорость в этом интервале будет равна $v_{cp} = \Delta x / \Delta t$. Если Δt стремится к нулю и если функция, описывающая траекторию, достаточно плавная, то v_{cp} будет стремиться к определенному пределу, который

мы определим как скорость в данной точке. Таким образом, хотя мы и не можем представить эту скорость непосредственно при помощи какой-то воображаемой картины, но можем дать ей математическое определение.

Вопрос о том, всегда ли существует этот предел, очень детально изучался математиками. Предел действительно существует для простых функций типа $\sin \omega t$, но математики могут легко указать на такие функции, которые повсюду имеют разрывы и потому не имеют производных в каждой точке. Рассмотрим, например, функцию, которая равна нулю всегда, когда независимая переменная представляет собой рациональное число, и равна единице для иррациональных чисел. Эта функция полностью разрывна. Однако в книгах по физике такие функции не рассматриваются, там молчаливо предполагается, что все функции, описывающие движение реальных материальных частиц, непрерывны и дифференцируемы. Это условие принимается, потому что оно кажется наиболее естественным. Но почему непрерывное движение кажется для нас наиболее естественным? Действительно, многие древние греки не были способны понять представление о непрерывном движении; чтобы убедиться в этом, достаточно вспомнить известные парадоксы Зенона. Один из самых знаменитых парадоксов относится к летящей стреле. Так как в каждый момент времени стрела имеет определенное положение, то она не может двигаться в то же самое время. Отсюда Зенон заключил, что движение в некотором смысле иллюзорно. Многие ранние греческие философы не могли доказать, что непрерывное движение — действительно такая уж естественная вещь.

Между античными временами и современностью наши представления о непрерывности движения развивались на примерах орбит планет, траекторий пуль и т. д. и на соответствующих теориях, основанных на дифференциальном исчислении. После изучения всех этих явлений последующие поколения постепенно начали считать само собой разумеющимся представление о непрерывном движении. Но единственным путем для выяснения того, действительно ли движение частиц может быть описано функциями с производными, является экспериментальная проверка. Другими словами, классические представления, что частица имеет траекторию, в каждой точке которой может быть определена производная, основаны только на экспериментальных доказательствах. Со времен Ньютона большой успех классической теории был обеспечен солидным опытным обоснованием, и по природе вещей казалось несомненным, что непрерывная траектория есть единственный возможный путь, по которому могут двигаться реальные материальные тела. Однако если следовать по чисто логическому пути, то нет никаких причин предпочесть понятие о непрерывности траектории представлению о разрывной траектории. Вполне возможно, что $\Delta x / \Delta t$ приближается к пределу, когда Δt уменьшается, а при

дальнейшем уменьшении Δt перестает стремиться к пределу. Мы можем рассмотреть, например, опыт по измерению Δx для реального тела, пользуясь все меньшими и меньшими интервалами Δt . Сначала такая процедура дает сведения со все возрастающей точностью о скорости тела. Но постепенно мы достигнем таких маленьких интервалов времени, для которых станет существенным броуновское движение, и тогда $\Delta x/\Delta t$ перестанет стремиться к определенному пределу. Можно было бы предположить, что эта трудность обходится рассмотрением движения отдельных молекул. Но опыты, которые привели к квантовой теории, показали, что если Δt сделать слишком малым, то эта попытка тоже окажется безуспешной. Мы приходим к выводу, что при очень точном описании представление о непрерывной траектории неприменимо к движению реальных частиц *) **).

7. Причина и следствие. Из предыдущих рассуждений видно, что представления о разрывной форме квантовых процессов не лишены смысла. Рассмотрим теперь вопрос об отсутствии динамического детерминизма. Проблемы причинности занимают одно из центральных мест во всех философских дискуссиях с тех пор, как человек впервые сделал попытку получить более полные общие представления об окружающем его мире, чем это можно было сделать из непосредственных ощущений. Поэтому мы начнем с краткого перечня различных представлений о причинности, возникших у человека, и покажем, на какой основе развились современные представления по этому вопросу.

8. Ранние представления о причине и следствии. Некоторые самые примитивные представления о причине и следствии, по-видимому, возникли, когда человек заметил, что, преодолевая различные силы со стороны окружающей его среды и производя работу, он мог создавать желаемые эффекты или избегать нежелательных. Поэтому самые примитивные представления о причинности тесно связаны с механическими понятиями силы и работы. Действительно, человек

*) Дальнейшее описание взаимоотношений между непрерывной и разрывной формами движения материи дается в гл. 22, п. 14. См. также изложение принципа дополнительности в п. 15.

**) В связи со всем вышеизложенным следует напомнить слова Ф. Энгельса о диалектической природе всякого движения и его простейшей формы — механического перемещения: «Движение само есть противоречие; уже простое механическое перемещение может осуществиться лишь в силу того, что тело в один и тот же момент времени находится в данном месте и одновременно — в другом, что оно находится в одном и том же месте и не находится в нем. Постоянное возникновение и одновременное разрешение этого противоречия — и есть именно движение» [83*]. Сравнения автора наших наивных представлений о природе движения и о квантовомеханических свойствах микрочастиц можно рассматривать лишь как очень грубую и наглядную аналогию, не касающуюся внутренней природы микроявлений. — *Прим. ред.*

мог оказывать влияние на другие материальные системы, только прилагая силу и производя работу.

Позже возникла мысль, что человеческое тело сделано из материи такого же типа, как и неодушевленные предметы. Вначале, возможно, предполагали, что такие тела могут действовать друг на друга так же, как и люди. Так могли прийти к понятию о неодушевленных причинах. В связи с этим следует заметить, что конечное следствие не всегда находится в пропорции с причиной. Существуют неустойчивые системы, например, камень, висящий на краю горы, может создать чудовищные эффекты в результате действия сравнительно маленькой приложенной силы.

Наряду с мыслью о материальных силах как причинах, вероятно, возникло представление о магии (т. е. по существу о получении следствий без вмешательства материальных сил и производства работы). Такое представление очень заманчиво и последовательно, но опыт показал, что таких магических причин не существует. Поэтому этот тип закона о причине и следствии должен быть исключен.

Легко догадаться, откуда берет начало понятие магической вероятности. Человек обнаружил, что он может влиять на других не только при помощи материальных сил, но также при помощи слов и знаков, которые как будто бы не требуют таких сил. Он естественно распространил это на неодушевленные предметы, и предположил, что подходящие магические слова и знаки должны влиять на них так же, как на людей. Эта мысль может быть высказана в общей форме, а именно, что слова, знаки, символы и мысли есть непосредственная причина последующих результатов. С тех пор найдено, что звук и свет создают материальные силы, и теперь имеется единая точка зрения, что только при посредстве материальных сил можно оказывать воздействие на другие предметы как одушевленные, так и неодушевленные. В связи с этим надо вспомнить, что люди действуют подобно очень неустойчивым системам, так как сравнительно маленькие силы, заключенные в световых и звуковых волнах, могут создавать большие эффекты. Теперь имеются такие устройства, как фотоэлементы и микрофоны, которые при помощи электронных реле могут отзываться на малые силы звука и света и в итоге создавать большие эффекты.

Человек в древности выдвинул и другой тип законов причинности, а именно теологическое понятие «конечной цели», согласно которому события управляются не столько предшествующими этим событиям условиями, сколько конечной целью, к которой стремится вся вселенная. Такое представление причины, вероятно, было совершено экстраполяцией на все материальные системы чувства цели, которое безусловно играет важную роль в управлении действиями людей. Однако такая экстраполяция, подобно понятию о знаках и символах как причине, никогда не получала веского экспериментального под-

тверждения, поэтому мы теперь не приписываем цели неодушевленным предметам и говорим об этом лишь как о метафоре.

Вывод, который можно сделать из всего этого, заключается в том, что наши представления о причине и следствии, вместе со всеми остальными нашими представлениями, вероятно, произошли путем экстраполяции наиболее непосредственных человеческих экспериментов в более широкий класс явлений. Из множества типов причинных законов, установленных таким путем, до сих пор выдержало проверку опытом лишь представление о материальных силах как причине. Однако мы должны помнить, что точная форма, которую приняло это понятие, определялась длительными опытами с классически описываемыми системами, и если убедительные опыты из квантовой области указывают на необходимость дальнейшего изменения этих законов, то нет никаких веских причин, почему такие изменения не следует делать *).

9. Полный механический детерминизм и причинность как тенденция. Здесь следует обратить внимание на то, что даже в очень давние времена появились два различных общих типа причинных законов. Один из них включал представление полного (механического) детерминизма, другой — представление о причине, определяющей не полностью поведение системы, а лишь общую тенденцию в этом поведении. Одним из самых ранних примеров полного детерминизма являлось представление о том, что весь ход событий предопределен фатально, причем не во власти человека что-либо здесь изменить. Происхождение таких идей не может быть точно установлено, но вполне возможно частично объяснить их возникновение потому, что человек чувствовал себя во власти сил природы, которые, как казалось ему, не могли быть подвластны человеческому контролю. Отсюда возникла поэтическая аллегория о человеческой жизни, как о корабле, плывущем во власти ветра и волн.

Хотя некоторые древние философы систематически развивали такие идеи, но весьма сомнительно, чтобы понятие полного детерминизма когда-нибудь глубоко проникало в практическую жизнь. Наоборот, в связи с обыденными опытами, значительно вероятнее возникновение представления, что определенная сила или причина создает лишь тенденцию к реализации какого-то эффекта, но не гарантирует его. В те времена работа в большинстве случаев производилась вручную или при помощи животных. При таких методах не мог производиться точный контроль сил. Для получения желаемых эффектов давался толчок в примерно правильном направлении и толчок обратно, если первый толчок был слишком сильный. Силу применяли для

*) Здесь и ниже автор в наивной и несколько многословной форме излагает материалистические представления о влиянии человеческой практики на формирование учения о причинности. — *Прим. ред.*

создания движения в определенном направлении, не интересуясь слишком точно, к каким результатам это приведет. До появления машин фактически все действующие силы носили такой характер, что самое большее требовались рассудительность и до некоторой степени искусство, чем точный контроль движения.

Весьма вероятно, что современная форма представления о полном детерминизме возникла, по крайней мере частично, по образу и подобию сложного и точно сконструированного механизма (типа часов). С развитием астрономии, баллистики и вообще механики, имеющих дело с системами, в которых действие причинных законов можно было детально проследить, представление о точной причинности или полном детерминизме начало быстро развиваться, и в ньютоновских законах движения оно получило точное количественное выражение. Позже предметом исследования стали быстро движущиеся механизмы, в которых было существенно точное определение движения всех их частей. В результате практически каждый был готов допустить, что и в атомных масштабах все процессы, происходящие во вселенной, могут быть поняты при помощи таких механических аналогий, и потому их можно считать полностью динамически детерминированными. В эту историческую эпоху (XVI—XIX века) точка зрения, что мир представляет собой один огромный механизм, вытеснила более ранние представления о сходстве неодушевленных предметов с людьми и животными *).

10. Классическая теория как предписывающая, а не причинная. Такова ирония судьбы, что в момент, когда причинные законы получили точное выражение в форме уравнений движения Ньютона, представление о силах как причинах событий стало ненужным и почти бессмысленным. Это представление потеряло свою значимость, потому что *и прошлое, и будущее* всей системы в целом полностью определяется уравнениями движения всех частиц, связанными с их координатами и скоростями в любой момент времени. Таким образом, мы не можем больше предпочесть утверждение, что будущее обусловлено прошлым, утверждению, что прошлое обусловлено будущим. Вместо этого мы говорим, что движение всех частиц во времени и пространстве предписано рядом законов, т. е. дифференциальными уравнениями движения, которые включают только эти пространственно-

*) Имеется резкое различие между механистическим причинным описанием движения планет, данным Ньютоном, и описанием многих философов древности и средних веков. Последние утверждали, что планеты движутся по окружностям. Такое утверждение основано на предположении, что окружность — это единственная идеальная геометрическая фигура, а такие небесные тела, как планеты, должны, конечно, двигаться только по совершенным орбитам. Здесь они пользовались понятием конечной цели в своем стремлении к совершенству. В ньютоновском же описании вводится аналогия с огромным механизмом, неумолимо требовавшим выполнения определенных движений.

временные движения. Поэтому пространственно-временной порядок событий определен во всякий момент времени, но это определение не является результатом действия чего-то похожего на примитивное одушевленное понятие «причины».

Конечно, понятие силы как причины может быть сохранено; действительно, оно кажется удобным для практического использования. Однако с чисто логической точки зрения понятие силы является излишним, так как в принципе всегда возможно выразить всю классическую физику при помощи координат, скоростей и ускорений всех частиц вселенной. Тогда закон тяготения может быть выражен следующим образом: два тела испытывают взаимное ускорение в направлении соединяющей их линии, обратно пропорциональное квадрату расстояния между ними. Ускорение одного тела также прямо пропорционально массе другого. Точно так же все другие законы могут быть выражены без помощи понятия силы. Например, сила, действующая на пружину весов, в принципе может быть выражена через координаты всех молекул весов.

Тогда принцип экономии мышления должен подтвердить, что, за исключением удобства, выражающегося в учете влияния многих ускорений, понятие силы как причины ускорения должно быть исключено и заменено представлением, что частицы просто движутся по определенным траекториям, определяемым уравнениями движения. Следовательно, классическая теория приводит к точке зрения предписывающей, а не причинной *).

11. Новые свойства квантовых представлений: приближенная и статистическая причинность. С появлением квантовой теории была показана ошибочность понятия полного (механического) детерминизма, которое было заменено представлением о причинах, определяющих лишь статистическую тенденцию возникновения данного следствия. Кроме того, квантовая теория явилась новым этапом в направлении к менее софистическим представлениям, возникающим из обычных опытов, в которых редко удавалось установить точную связь между причиной и следствием и обычно принималось, что причина определяет в явлении лишь качественную тенденцию в данном направлении.

Механический детерминизм классической теории проистекает из факта, что однажды заданные начальные координаты и скорости

*) В п. 14 мы увидим, что квантовая теория приводит к совершенно отличному описанию движения материи.

В связи со сказанным автором здесь и ниже следует напомнить замечание В. И. Ленина в его конспекте книги Гегеля «Наука логики»: «Причина и следствия, эго, лишь моменты всемирной взаимозависимости, связи (универсальной), взаимосцепления событий, лишь звенья в цепи развития материи». И дальше: «Всесторонность и всеобъемлющий характер мировой связи, лишь односторонне, отрывочно и неполно выражаемой каузальностью» [84^а]. — *Прим. ред.*

любой частицы во вселенной определяют ее последующее поведение в любой момент времени в соответствии с уравнениями движения Ньютона. Но в квантовой теории законы движения Ньютона нельзя применить подобным образом к индивидуальному электрону, потому что координата и импульс не могут даже существовать при условии одновременного определения с идеальной точностью. Предположим, например, что мы хотим попасть электроном в данное место — пятно на экране. Для этого необходимо было бы прежде всего определить, где электрон находится в данный момент, а затем сообщить ему импульс, который *обусловит* его движение к желаемому месту. Согласно соотношению неопределенностей, этого сделать нельзя, следовательно, понятие механического детерминизма неприменимо при квантовомеханическом описании электрона.

Мы нашли, что хотя в квантовой теории нет механически детерминированных законов, но там существуют статистические законы. Например, в серии многих наблюдений можно измерить величину координаты частицы через время Δt , если начальные условия каждый раз воспроизводятся так точно, как это допускается квантовой природой вещества. Эта величина флуктуирует от одного измерения к другому, но остается близкой к среднему значению, определяемому по величине импульса формулой

$$\overline{\Delta x} = \frac{p}{m} \Delta t.$$

(Это уравнение справедливо только в той мере, в какой можно определить импульс.) Если электрон нацелен в определенную точку при соответствующем контроле значения его импульса, то мы получаем достаточно хорошо воспроизводимую картину отдельных попаданий около этой точки. *Для изменения положения центра пятна необходимо изменить импульс системы.* Но, даже если импульс определен точно, мы не можем предсказать или контролировать точное место, в которое в действительности попадает электрон. Следовательно, в квантовой теории, так же как и в общем опыте с немеханической формой материи, в каждом случае определяется только статистическая тенденция хода событий, а не их точный результат.

12. Энергия и импульс в классической и квантовой теориях. Перейдем теперь к более детальному рассмотрению применения в квантовой теории понятия причинности как статистической тенденции. Прежде всего более точно определим, что понимается под энергией и импульсом в классической и в квантовой теориях. Такое определение необходимо, поскольку эти величины играют основную роль при точной формулировке механически причинной стороны поведения материи.

В классической механике энергия тела определяется его способностью производить работу над другими телами. (*Работа опреде-*

ляется как произведение силы, взаимодействующей между телами, на расстояние, которое эта сила должна преодолеть.) Так как такое определение дает лишь изменение энергии, то нулевое значение энергии может быть выбрано произвольно.

Если тело способно производить работу за счет изменения его состояния движения, то говорят, что оно обладает *кинетической энергией* ($T = mv^2/2$). Если тело может производить работу за счет изменения своего положения, то говорят, что оно обладает *потенциальной энергией* $V(x)$. Однако в действительности всякая энергия есть скрытое или потенциальное свойство материи, так как она характеризует потенциальную способность производить работу, которая реализуется, лишь когда вещество изменяет свое состояние при взаимодействии с другим веществом. Однако из-за существования энергии излучения нужно обобщить это определение, учтя и тот факт, что так называемое «пустое пространство» тоже обладает потенциальной возможностью совершать работу, в силу своей способности содержать электромагнитное поле. Наконец, согласно теории относительности, нужно включить добавочно ко всем другим типам энергии так называемую «энергию покоя», которая представляет собой потенциальную способность материи совершать работу в процессе аннигиляции *). Таким образом, самое общее определение изменения энергии любой системы (обычного вещества, электромагнитного поля, или чего-либо другого) — это ее потенциальная способность совершать работу относительно другой системы в процессе взаимодействия и соответствующего изменения состояния обеих систем.

Можно спросить, почему в механике энергия играет более важную роль, чем другие функции, скажем mv^3 или $Atgsh(mv)$. Основная причина заключается в том, что полная энергия любой изолированной системы сохраняется неизменной, в то время как, в общем случае, для большинства других функций таких законов сохранения не найдено **). Этот факт и указывает на то, что энергия принадлежит к действительным физическим свойствам материи. Несмотря на это, было бы неправильно думать об энергии, как о некой субстанции, которая добавляется к материи, как сахар к воде, поскольку энергия как таковая никогда не была обнаружена в изолированном виде. Наоборот, лучше принять представление, что энергия — это потенциальная способность какой-нибудь системы (вещества или электромагнитного поля) производить работу. Эта потенциальная

*) Это неудачное выражение. Следует сказать не в процессе «аннигиляции» (уничтожения), а в процессе превращения из одной формы в другую, например, поглощение света атомами, рождение позитронно-электронных пар из γ -кванта и т. п. — *Прим. ред.*

**) Помимо энергии, сохраняются также импульс и момент импульса,

способность в процессе взаимодействия может быть передана другой системе, но общее количество ее никогда не изменяется *).

Импульс отдельной частицы определяется выражением $p = mv$. Поскольку полный импульс изолированной системы не изменяется, то мы должны также рассматривать его как реальное физическое свойство вещества (и электромагнитного поля). Действительно, можно провести полную параллель между импульсом и энергией: изменение энергии при данном изменении состояния можно определить как потенциальную способность тела производить работу, а изменение импульса можно определить как его потенциальную способность при взаимодействии с другим телом создать количество движения. (Импульс силы определяется, как $I = Ft$, где t — время в течение которого действует сила F .) Тогда можно выбрать произвольное значение нуля для импульса каждого тела, которое удобнее всего связать с состоянием покоя тела.

В классической теории с логической точки зрения не является абсолютно необходимым считать энергию и импульс фундаментальными свойствами материи. Это лишь удобный и соблазнительный способ описания, основанный на законах сохранения этих величин. Но так как энергию и импульс можно выразить в функциях координат и скоростей, то, как показано в п. 10, они являются излишними понятиями, поскольку все законы движения можно выразить непосредственно через движение в пространстве и времени.

Однако в квантовой теории энергию и импульс нельзя представить как функции координат и скоростей. Классический механический импульс определяется выражением

$$p = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} m \frac{\Delta x}{\Delta t}.$$

Но, как мы уже видели, в квантовой области этот предел в действительности не существует, когда интервал времени Δt делается слишком малым. Однако мы не можем перестать считать импульс реальной величиной не только потому, что он играет важную роль при контроле статистического поведения пространственно-временных движений (см. п. 11), но также и потому, что импульс можно определить в квантовой теории из соотношения де Бройля $p = h/\lambda$, хотя уже и нельзя описать движение вполне определенными орбитами в пространстве и времени. Единственная возможность, остающаяся, по-видимому, здесь открытой, — это рассмотрение импульса как независимого физического свойства вещества, которое в классическом

*) С точки зрения диалектического материализма необходимым свойством материи является движение, а энергия есть одна из мер этого движения; ее сохранение есть непосредственное следствие сохранения материи и ее движения. Импульс и момент импульса, масса тела и т. п. являются также мерами движения материи. — *Прим. ред.*

пределе определяет потенциальную способность создавать количество движения, или, в более общей формулировке, — это величина, однозначно связанная с длиной волны де Бройля и статистически с пространственно-временным движением материи. Следовательно, когда мы говорим, что электрон обладает определенным импульсом, то это утверждение имеет такое же значение, как и утверждение, что он занимает данное положение. Ни одно из этих утверждений не требует дальнейшего анализа. Поэтому мы должны считать, что импульс и энергия — это свойства, присущие материи, свойства, которые не могут быть непосредственно представлены, но которым просто даны названия *импульс* и *энергия*. Мы знаем, что они существуют, так как оказывают влияние, которое нельзя объяснить при помощи следующего классического предположения: пространственно-временные движения управляются законами, включающими только одни кинетические характеристики этого движения.

Используя наше представление, что импульс и энергия являются основными, а не производными величинами, покажем теперь, что их можно измерить, даже не пользуясь детальным пространственно-временным описанием движения всех частиц системы. Действительно, в гл. 5 было показано, что импульс можно измерить с помощью дифракционной решетки или же измерить градиент потенциала, необходимый для затормаживания частицы до состояния покоя. Ни один из этих методов не требует детального пространственно-временного описания. При помощи таких измерений можно доказать, что энергия и импульс сохраняются даже в квантовой области. Следовательно, во всех отношениях понятия энергии и импульса не зависят от точного пространственно-временного описания движения материи.

13. Импульс и энергия, и причинная форма описания материи. Теперь попытаемся доказать, что и в классической, и в квантовой теории точная причинная форма описания движения материи включает определение энергий и импульсов всех входящих в рассмотрение частей системы. Начнем с более точного определения того, что мы понимаем под термином «причинная форма» описания движения материи. При полном описании поведения системы всегда входят два различных, но связанных элемента. Прежде всего простой пространственно-временной порядок событий, описывающих это поведение. Другими словами, мы должны сказать, *что* происходит. Но обычно мы не удовлетворяемся лишь сведениями о происходящем, так как также хотим знать, *почему* это произошло. Другими словами, мы ищем возможность причинного описания связи между событиями наряду с пространственно-временным описанием самих событий.

Сама попытка получить такое причинное описание включает молчаливое предположение, что связь между событиями действительно обусловлена своего рода причинными факторами, которые существуют внутри материи и до некоторой степени способны осуществить

рассматриваемые события. В классической физике такими причинными факторами являются силы, действующие на каждую частицу системы (хотя, как мы видели в п. 10, понятие силы как причины в классической теории излишне). Затем причинные связи содержатся в законах движения Ньютона, а именно каждая частица стремится двигаться равномерно и прямолинейно, если только на нее не действует сила, создающая пропорциональное ускорение. Таким образом, силы можно считать *причинами* изменения скорости. Эти силы могут быть или внутренними, т. е. действующими между частями самой системы, или же действующими извне. В любом случае, если эти силы определены для всех моментов времени и если даны начальные положения и скорости, то дальнейший ход движения определен для всех моментов времени. Можно воспользоваться этим фактом для предсказания движения на основе знания начальных условий и можно также использовать его для изменения и контроля дальнейшего хода движения, прилагая соответствующие внешние силы к определенным частям системы.

В квантовой теории понятием силы пользоваться труднее. Значительно легче работать с понятиями импульса и энергии, потому что соотношения де Бройля дают простую связь между длиной волны и импульсом. Таких простых соотношений не существует между волновыми свойствами материи и силой. Мы можем грубо определить силу как *среднюю скорость изменения* импульса (см. гл. 9, п. 26). Это совпадает с классическим определением в соответствующем предельном случае и предусматривает расширение этого понятия на квантовую область. Но, за исключением демонстрации связи между классически определяемыми силами и квантовой теорией, это определение не приносит никакой практической пользы. Наоборот, значительно удобнее воспользоваться определением, данным в пп. 11 и 12, т. е. рассматривать импульс как фундаментальное и не подлежащее дальнейшему анализу свойство материи, которое, в той мере, в какой оно известно, статистически определяет только проходимость частицей за данное время среднее расстояние, определяемое уравнением

$$\frac{d}{dt}(\bar{x}) = \frac{p}{m}.$$

Таким образом, мы должны рассматривать импульс как прямую причину движения материи, а не следовать классическому определению и считать силу причиной изменения движения. Если система представлена самой себе, то она, как и в классической теории, претерпевает некоторый характеристический тип движения с тем лишь исключением, что в квантовой теории ход этого движения определяется лишь статистически импульсами всех влияющих на движение частей. Если мы хотим изменить или проконтролировать статистику

ческую тенденцию этого движения, то это можно сделать, лишь изменяя импульс (и энергию) соответствующих частей. Следовательно, соответствующие энергии и импульсы являются причинными факторами, присущими веществу. Они контролируют связь между разновременными событиями динамически в классической теории и статистически в квантовой *).

14. Связь между пространственно-временным и причинным описанием материи. Теперь мы можем показать, что квантовая теория приводит к новому представлению о связи между пространственно-временным и причинным описаниями материи. В этом представлении обе формы описания являются двумя сторонами единого целого, но еще не столь близкими, чтобы можно было исключить необходимость пользоваться этими двумя различными формами.

Выясним смысл этого представления, воспользовавшись прежде всего результатами, полученными в пп. 10 и 12. Там говорилось, что квантовая теория не может быть изложена как классическая теория, в которой пространственно-временные движения в различные моменты времени связываются при помощи ряда правил типа предписаний. Энергия и импульс (а следовательно, и причинные факторы) не могут быть выражены через скорости и координаты частиц, составляющих квантовую систему. Таким образом, квантовомеханическое представление о причинности отличается от классического необходимостью выявить связь между пространственно-временными событиями в результате существования «причинных» факторов (т. е. импульсов), присущих самой материи, которые являются основными не анализируемыми дальше категориями, как и сами пространство и время. Правда, эти причинные факторы определяют лишь статистический ход пространственно-временных событий, но как раз это обстоятельство, т. е. отсутствие механического детерминизма, и спасает причинные факторы от того, чтобы стать излишними, и тем самым придает реальное содержание понятию причинности в квантовой теории.

Сохранение как пространственно-временной, так и причинной формы объяснения свойств материи в том смысле, что ни одна из них не может быть точно определена, приводит к совершенно новому представлению об этих понятиях. А именно вместо того, чтобы считать пространственно-временную и причинную формы существующими одновременно в точно определенном смысле, мы теперь рассматриваем их как противоположные возможности. Каждая из этих возможностей может проявиться в наиболее точно определенной форме лишь при взаимодействии с соответствующей системой, но

*) Поэтому импульс будет часто называться «причинным фактором» или «причинной формой», присущей веществу.

только за счет потери в степени определенности другой из них *). Следовательно, если электрон взаимодействует с прибором, измеряющим координату, то будет определено сравнительно точно его положение, но при этом соответственно уменьшается степень определенности импульса. С другой стороны, если электрон взаимодействует с прибором, измеряющим импульс, то будет определена сравнительно точно величина импульса и соответственно теряется степень определенности его положения. Больше того, как было показано в гл. 6, п. 10, такие изменения в определенности различных свойств происходят не только при взаимодействии с измерительной аппаратурой, но и в более общем случае при взаимодействии с любым материальным телом. В соответствии с нашим новым представлением материя обладает возможностями для проявления либо сравнительно точно определенных причинных соотношений между сравнительно плохо определенными пространственно-временными событиями, либо сравнительно плохо определенных причинных соотношений между сравнительно точно определенными пространственно-временными событиями, но в природе не реализуются одновременно обе эти возможности **). Какая из этих возможностей реализуется более полно в данном конкретном случае, частично зависит от систем, с которыми взаимодействует рассматриваемый объект. С течением времени может проявиться более сильно любая из возможностей, если объект взаимодействует с различными системами. Таким образом, мы пришли к представлению о материи, как о чем-то, объединяющем две формы описания — пространственно-временную и причинную. Эти формы были бы несовместимы, если бы определялись точно, но не полностью определенные они существуют совместно. Они противоположны друг другу в том смысле, что степени их определенности обратно пропорциональны друг другу.

Так как волновая функция может быть выражена или полностью как функция координат, или полностью как функция импульса, то на первый взгляд может показаться, что для полного описания поведения вещества действительно необходима только одна из этих форм. Но следует напомнить, что волновая функция будет полностью определена в соответствующем представлении только, если известны и амплитуда, и фаза. Но, как мы видели в гл. 6, п. 4—10, амплитуды в соответствующем представлении определяют вероятность появления данного значения переменной, связанной с этим представлением, а фазовые соотношения более тесно связаны с вероятностью распределения сопряженных переменных.

Поэтому физический смысл фазовых соотношений может быть понят только при измерении сопряженной переменной. Например, в координ-

*) В гл. 6, пп. 9 и 13 мы уже узнали, что микросвойствам материи присущи противоположные возможности, которые определяются более точно только одна за счет другой и при взаимодействии с соответствующим материальным окружением.

**) Например, пространственно-временные события могут быть описаны, если указано, что частицы находятся в определенных областях пространства и времени, тогда как причинные соотношения описываются импульсами всех рассматриваемых частей системы (см. п. 13).

натном представлении фазовые соотношения волновой функции не могут быть поняты в терминах пространственно-временной локализации частицы и требуют для своей физической интерпретации введения понятия импульса. Следовательно, волновая функция неявно содержит пространственно-временную и причинную формы описания материи (и каждое описание, конечно, включает промежуточную степень точности, так что не нарушается соотношение неопределенностей). Соответственно для получения качественного объяснения природы вещества из квантовой теории мы должны сохранить оба описания, каждое с промежуточной и поддающейся изменению степенью точности.

15. Принцип дополнительности. В предыдущем пункте было показано, что основные свойства материи (такие, как импульс и координата) совместимы только тогда, когда каждое из них определено с промежуточной степенью точности, так что не нарушается соотношение неопределенностей. Во всех теориях, предшествовавших квантовой механике, молчаливо предполагалось, что можно полностью описать поведение вещества в соответствующих динамических переменных. Все эти переменные в принципе могут быть определены одновременно с любой точностью. Таким образом, представление о том, что основные свойства материи в общем случае не могут быть заданы точно, является существенным изменением в характере понятий, используемых в физических теориях. Это изменение действительно настолько существенно, что оно привело Бора к провозглашению общего принципа, названного им «принципом дополнительности». Все значение этого принципа можно оценить только после детального знакомства с его проявлением в большом числе частных случаев. Однако мы постараемся здесь разобрать его сущность на нескольких простых примерах, а затем сформулировать его в более общей форме.

Начнем с импульса и координат. В классической физике можно сказать, что импульс частицы находится или внутри некоторого интервала между p и $p + dp$, или вне этого интервала. Но в квантовой теории, если волновой пакет шире интервала dp , уже нельзя больше сказать, что импульс частицы определенно находится в каком-то данном интервале dp . Неправильно также говорить, что он определенно находится вне этой области. Взамен мы говорим, что при этих условиях импульс просто является неточно определенным свойством (хотя его можно бы лучше определить за счет уменьшения степени определенности координаты, например для электрона, который взаимодействует с устройством, измеряющим импульс).

Неясностью в определенности импульса не исчерпывается физическое содержание расплывания волновой функции в пространстве импульсов, потому что (см. гл. 6, п. 6) фазовые соотношения в пространстве импульсов определяют распределение координат. Аналогично фазовые соотношения в пространстве координат определяют распределение импульсов. Следовательно, неполная

определенность импульса и координаты существенна потому, что внутри области неопределенности каждого из них существуют факторы, ответственные за определенность другого. Таким образом, импульс и координату можно было бы назвать «тесносвязанными переменными», хотя даже такое определение недостаточно, так как оно не учитывает, что само существование каждой из этих величин требует определенной степени неопределенности другой. Более точным определением было бы название «тесносвязанные возможности», указывающее на противоположные свойства, которые могут быть сравнительно точно определены при различных условиях.

На все это можно возразить, что если мы описываем вещество только при помощи волновой функции, то необходимость в неопределенных или «потенциальных» свойствах возможно и отпадет, так как в конце концов волновая функция может быть в принципе определена как угодно точно. Однако надо вспомнить, что волновая функция находится не в точном (динамическом) соответствии с действительным поведением вещества, а лишь в статистическом (гл. 6, п. 4). Поэтому волновая функция не имела бы физического смысла без указания ее связи с вероятностью того, что система будет иметь определенное положение или определенный импульс в зависимости от характера измерительной аппаратуры, с которой эта система взаимодействует. Но эта вероятность имеет точное соответствие только со средними значениями переменных*), которые могут быть получены в ряде опытов, производимых при одинаковых начальных условиях (гл. 6, п. 1). Пока речь идет об отдельном электроны, остается справедливым утверждение, что есть предел точности, с которой одновременно могут быть определены положение и импульс. Следовательно, можно считать, что индивидуальный электрон находится в состоянии, где эти переменные действительно неточно определены, а существуют лишь как противоположные возможности. Эти возможные компоненты дополняют друг друга, так как каждая из них необходима при полном описании физических процессов, в которых обнаруживается электрон; отсюда название «принцип дополненности».

Приведем теперь более общую формулировку принципа дополненности: *в области квантовых явлений наиболее общие физические свойства какой-либо системы должны быть выражены при помощи дополняющих друг друга пар независимых переменных, каждая из которых может быть лучше определена только за счет соответствующего уменьшения степени определенности другой.* Ясно, что этот принцип находится в резком противоречии с классическим представлением о системе, которую можно

*) Следует указать, что, кроме того, знание волновой функции дает нам также вполне точные сведения и о собственных значениях физических величин, для операторов которых данная волновая функция является собственной функцией. — *Прим. ред.*

описать, определив все входящие независимые переменные как угодно точно. В квантовой теории дополнительные пары переменных представляют до некоторой степени противоположные возможности, каждая из которых может быть сделана более точной величиной, но только при условии, что другая превратится в менее точную величину. Это не означает, конечно, что дополнительные переменные, если только они определены не слишком точно, являются в действительности несовместимыми. Но значит, что только *высокая* точность определения каждой переменной несовместима с высокой точностью определения другой.

Наиболее известными примерами возможных дополнительных пар являются канонически сопряженные переменные классической механики, такие, как импульс и координата, энергия и время. Так как одна из них всегда относится к причинной форме описания материи, а другая к пространственно-временной, то, следовательно, причинная и пространственно-временная формы являются дополнительными. Принцип дополнительности не ограничивается динамическими переменными, а применим также к более общим понятиям. Например, мы видели в гл. 6, пп. 9 и 13, что волновая и корпускулярная формы свойств материи являются противоположными, но дополнительными способами реализации потенциальных возможностей, заключенных в данном куске вещества. Каждая из этих форм может быть выявлена при взаимодействии с соответствующим материальным окружением.

Другим примером дополнительной пары понятий являются непрерывность и дискретность. Вспомним, например, что при переходе между двумя различными энергетическими уровнями в атоме электрон перескакивает с одного уровня на другой, не задерживаясь в состояниях с промежуточными значениями энергии. С другой стороны, волновая функция изменяется непрерывно от области пространства, соответствующего начальной орбите, к области пространства, занятого конечной орбитой. Мы еще не разработали математического аппарата, требуемого для детального решения этой проблемы, но в гл. 22, п. 14 будет показано, что непрерывные и дискретные формы перехода являются дополнительными в том смысле, что они обе нужны для полного описания процесса, несмотря на несовместимость высокой точности определения любой из этих форм с высокой точностью определения другой.

Дальнейшие примеры проявления принципа дополнительности будут приводиться в тексте книги. Но мы хотим здесь предвосхитить хотя бы качественно некоторые результаты последующих глав. Ниже будет показано (гл. 16, п. 25), что заданная система в принципе способна обнаруживать бесконечное разнообразие свойств, которые не могут все существовать одновременно в точно определенных формах. Таким образом, если начинать с пары свойств (или категорий),

скажем импульса и координаты, то мы находим, что не только ни одно из них не существует в точно определенной форме, но что есть также бесконечное число новых свойств (или категорий), которые могут стать определенными только, когда и импульс, и координата до некоторой степени неопределенны. Эти свойства действительно станут определенными только, когда рассматриваемый объект взаимодействует с соответствующей системой, например с измерительной аппаратурой, которая выявляет частное свойство в точной форме.

Таким образом, мы видим, что заданная система потенциально способна испытывать бесконечную вариацию превращений, в которых, фигурально выражаясь, растворяются старые категории, чтобы заместиться новыми категориями, которые зачеркивают старые. Следовательно, мы пришли к исключительно гибкому и динамическому представлению о природе материи, согласно которому каждый данный микрообъект может всегда избежать какой-либо точно определенной системы категорий, соответствующей данным условиям и, согласно классическим представлениям, постоянно ограничивающей его поведение определенным образом. Удивительный пример такого превращения появляется в связи с просачиванием «частицы» через потенциальный барьер, где так называемая «частица» способна проходить через классически непроницаемую область пространства, потому что барьер выявляет ее волновые возможности (см. гл. 11, п. 4 и п. 5).

Мы приходим, таким образом, к выводу, что принцип дополнительности представляет собой радикальное изменение характера понятий, применимых для описания микросвойств материи, по сравнению с характером понятий, пригодных в рамках классических макроявлений. (В связи с этим см. гл. 23.)

16. Неделимое единство мира. Мы теперь переходим к третьему существенному изменению в наших основных понятиях, вносимому квантовой теорией, а именно, что вселенную нельзя, строго говоря, расчленять на резко разграниченные части. Наоборот, ее следует рассматривать как неделимую единицу, а представление об ее отдельных частях может быть хорошим приближением только в классическом пределе. Этот вывод основан на тех же представлениях, которые привели к принципу дополнительности. Именно, что свойства материи представляют собой неточно определенные и противоположные возможности, которые могут быть полностью реализованы только при взаимодействии с другими системами (см. гл. 6, п. 13). Поэтому в микромасштабах объект не имеет каких-то «внутренних» свойств (например, волна или частица), принадлежащих только ему одному; он делится всеми своими свойствами взаимно и органически с системой, с которой он взаимодействует. Больше того, так как данный микрообъект (скажем, электрон) в разное время взаимодействует с различными системами, которые обладают различными возможностями, то он испытывает (как мы видели в п. 14) непрерывные

превращения между различными формами (например, формой волны и частицы), в которых он может проявляться.

Хотя до появления квантовой теории в физике элементарных частиц не была обнаружена такая текучесть и зависимость формы свойств от окружающей среды, она не чужда классическому эксперименту в такой области, как биология, где имеют дело со сложными системами. Так, например, при подходящих условиях окружающей среды бактерии могут принять вид спор, что совершенно отлично по структуре от их обычной формы; может быть и обратное превращение. Однако бактерии и споры рассматриваются как различные формы той же живой системы. Здесь имеется определенное сходство с квантовым поведением электрона, так как можно рассматривать волновые и корпускулярные формы электрона как различные «формы» той же материальной субстанции (см. п. 15, и ср. с принципом дополнительности). В обоих случаях подходящие условия окружающей среды могут выявить одну или другую форму из двух возможных типов поведения.

Однако есть и существенное различие между превращением бактерии в споры и изменением электрона из объекта, более похожего на волну, в объект, более похожий на частицу. Превращение бактерии в спору можно, по-видимому, рассматривать как перестройку различных частей бактерии и окружающей ее среды (т. е. атомов или молекул), вызываемую взаимодействием между этими частями. Но, как указывалось в гл. 6, п. 13, изменение формы существования электрона нельзя описать таким образом. Наоборот, это есть фундаментальное изменение того, что в классической физике называется «внутренней» природой электрона, изменение, которое не может дальше разлагаться на гипотетические составляющие части электрона и окружающей его среды. Таков именно смысл утверждения, что в микромасштабах вселенная есть одно неделимое целое, которое нельзя рассматривать состоящим из независимых частей.

Для уяснения применений этой точки зрения относительно квантовой природы материи мы приведем в следующих нескольких пунктах детальный анализ классического описания сложных систем, построенных из отдельных составляющих частей. Потом будет показано, что это описание терпит фиаско в квантовой области. Таким образом, мы придем к выводу, полученному более непосредственно в гл. 6, что вселенную надо рассматривать как неделимое целое.

17. Различие между объектом и окружающей средой в классической теории. Где бы ни рассматривался объект, природа которого существенно зависит от окружающей среды, будь это в классической, квантовой или какой-нибудь другой теории, мы согласимся, что недостаточно описание его как отдельной системы, и вместо этого следует изучать сложную систему, состоящую из объекта и окружающей его среды, как новую единую систему. Однако

в классической теории всегда предполагается, что даже когда интересующий нас объект сильно связан с окружающей средой, то их можно разделить в любой момент времени, поскольку они разделены пространственно. Так, например, при помощи микроскопа можно увидеть, когда что-то произойдет в определенной области пространства, и это в любой момент допускает объяснение, что именно эта область пространства занята сравнительно хорошо определяемым объектом, который можно назвать бактерией. (Хотя физическая граница, отделяющая бактерию от окружающей среды, может и не быть идеально тонкой, но она все же очень узкая по сравнению с размерами бактерии.)

Как следует описать, что происходит в такой системе с течением времени? Ясно, что между бактерией и окружающей ее средой существует сильное взаимодействие, во-первых, из-за наличия сил между ними и, во-вторых, вследствие обмена веществ. Действительно, через несколько часов большая часть вещества, которая первоначально была в бактерии, может быть вытеснена и заменена веществом из окружающей среды. В то же время бактерия может также превратиться в спор. Как можно тогда удостовериться, что это есть развитие той же самой живой системы, которую мы наблюдали в начале опыта? Подтверждение частично заключается в непрерывности процесса изменения, претерпеваемого бактерией, и частично в том факте, что в любой момент времени свойства бактерии и окружающей ее среды определяются причинными законами.

18. Роль непрерывности. Роль, которую играет непрерывность для возможности отождествления изменяющегося объекта, довольно ясна. Если, например, в бактерии осуществляются большие дискретные и неустойчивые изменения, то невозможно проследить ее тождественность с течением времени. Следовательно, непрерывность гарантирует, что бактерия будет «сохраняться» достаточно долго и ее можно будет увидеть и наблюдать. Это значит, что даже если происходят изменения, то влияние изменений можно всегда сделать произвольно малым, выбрав достаточно маленький интервал времени наблюдения.

19. Роль причинных законов. Роль причинных законов в отождествлении объекта наблюдения *независимо от его изменения*, вероятно, менее очевидна, но безусловно не менее важна. Значение причинных законов в этой задаче можно продемонстрировать, описав процедуру отождествления бактерии как таковой. Например, бактерию можно видеть, рассматривая ее в микроскоп. Но если бактерия не подчиняется причинным законам, по крайней мере в отношении преломления, поглощения и отражения света, то микроскоп не принес бы никакой пользы при ее определении как отдельного объекта. В другом важном испытании объект должен реагировать на внешние возмущения известным и надежным образом. Так, если бактерия

протыкается при помощи мельчайшей иголки, то она реагирует более или менее, как кусок желе, а не как кусок стекла. Если внести в среду какие-нибудь красители, то каждый тип бактерий обнаружит свою характерную реакцию на краску.

Можно было бы привести много таких примеров, но мы можем обобщить результаты большого числа экспериментов, сказав, что объект определяется при взаимодействии с разного рода силами. Эти силы могут иметь электромагнитное, механическое, гравитационное происхождение. Они могут также возникнуть из сил химического взаимодействия молекул или еще другими путями, которые здесь не упоминаются. (Заметим, что этот критерий включает также наблюдение объекта при помощи света.) Так как утверждение, что объект определенным образом реагирует на силы, предполагает, что он подчиняется причинным законам, то, следовательно, никакой объект наблюдения не может отождествляться как таковой, если он не подчиняется причинным законам.

Критерии того же типа используются при изучении элементарных частиц, таких, как протоны и электроны. Первым убедительным доказательством существования этих частиц было появление непрерывных треков в камере Вильсона, которые искривлялись электрическими и магнитными силами точно так, как должен был бы искривляться путь заряженной частицы. Это объясняется взаимодействием электрических и магнитных сил и ионизацией других атомов электрическими силами заряженной частицы, которая отождествляется или с электроном или с протоном.

20. Анализ и синтез. Если система движется непрерывно и подчиняется причинным законам, то с течением времени можно продолжать отождествлять ее с отдельным объектом, даже если она может сильно взаимодействовать с окружающей средой и испытывать сильные изменения в результате этого взаимодействия. Если такие изменения и происходят, то они могут быть поняты при помощи причинных законов. Таким образом, можно думать, что изменения в структуре бактерии, когда она переходит в стадию споры, обусловлены электрическими, магнитными и химическими силами между молекулами, составляющими бактерии и окружающую ее среду. И это как раз те силы, которые заставляют различные части системы двигаться таким образом, что со временем бактерия превращается в спору.

Теперь можно обобщить сказанное выше. Практически во всех областях знания, а также и часто в повседневной жизни мы молчаливо пользовались такой программой исследования: сначала следовало разложение целого на части, а затем синтезирование этих частей при помощи причинных законов. Если такая программа имеет смысл, то эти части должны иметь свойства, которые давали бы возможность их определять, по крайней мере в принципе, и описывать

их взаимодействие по причинным законам для образования из них целого.

На практике процесс отождествления всегда включает молчаливое предположение о непрерывности и причинности. Предполагается, что в какой-то момент времени каждая часть занимает определенную область пространства и имеет определенную форму и структуру, все части изменяются непрерывно с течением времени. Однако столь же важным является предположение, что мы можем приписать каждой части определенные и характеристические эффекты. Следовательно, при взаимодействии этой части с различными типами сил, применяемыми для испытания ее свойств, предполагается, что система подчиняется причинным законам. Так как в принципе каждый объект можно наблюдать или испытывать при помощи каких-либо сил, то следовательно, если систему можно разложить на тождественные части, она должна подчиняться причинным законам во всех взаимодействиях. В противном случае мы должны были бы усомниться в тождественности всех частей, так как все наблюдаемые значения не должны были бы обязательно приводить к тем же результатам. Те же общие требования непрерывности и причинности, без которых систему нельзя разложить на различные части, также необходимы для возможности описать, как все части совместно взаимодействуют, чтобы образовать целое. Таким образом, программы анализа и синтеза идут параллельно.

21. Применимость анализа и синтеза в классической теории. Совершенно очевидно, что, пока справедлива классическая физика, могут быть удовлетворены требования разложения вселенной на части и синтеза этих частей в одно целое. Это следует из предположения, что все части вселенной (например, атомы, молекулы, электроны) движутся непрерывно и подчиняются законам причинности.

22. Системы, описываемые классически, и существенно квантовомеханические системы. Посмотрим теперь, что произойдет, если попытаться распространить эти представления на квантовую область явлений. Для этого удобно провести различие между процессами, описываемыми классически, и процессами, существенно квантовомеханическими по своей природе. Согласно последним данным науки, все процессы, конечно, по своей природе квантовомеханические, но многие из них происходят в относительно больших телах и поэтому включают очень много квантов; в таких случаях детальное описание с точностью до микропроцессов несущественно, *потому что самые интересные черты в поведении системы не зависят сколь-нибудь существенно от того, участвуют ли в том или ином процессе на несколько квантов больше или меньше.* Такие процессы удобнее всего описывать с помощью лишь одной классической теории. Заметим, что различие между системами, которые могут быть описаны классически, и существенно квантовомеха-

ническими системами основано не на точности, с которой возможно произвести наблюдение, а, скорее, на том, зависят ли критически интересующие нас объекты от квантовых свойств материи или нет.

В качестве примера рассмотрим опять бактерию. По квантовым масштабам бактерия — это довольно большой объект, и потому следует ожидать, что большинство ее действий может быть объяснено с чисто классических позиций. Поэтому программу разложения клетки на части, с неперменной конечной целью понять, как эти части взаимодействуют и образуют целую клетку, можно, вероятно, обосновать непосредственно вследствие применимости классической теории ко всем ее составным частям. Не является исключением (и возможно не столь маловероятно), что в клетке может происходить «цепная реакция», которая может усилить эффекты определенных критических квантовых процессов до наблюдаемых классических масштабов. Если бы это было так, то необходимо было бы пересмотреть программу анализа и синтеза в свете квантовой теории, по крайней мере, когда дело касается этих критических свойств.

23. Попытка разложения квантовой системы на отдельные части. Когда мы переходим к микромасштабам, то появляются серьезные затруднения при попытке проведения анализа и синтеза. Эти трудности возникают из-за того, что применение причинных законов требует точного определения импульса каждой части системы, а это невозможно, когда система каким-нибудь путем точно локализована. В макроскопических масштабах это частичное отсутствие механического детерминизма несущественно, но когда мы пытаемся перейти ко все меньшим и меньшим частицам, то все труднее судить об их свойствах по их взаимодействию с внешними силами. Например, они перестают непрерывно и определенным образом отражать свет, а вместо этого начинают отражать его дискретно (в виде квантов) и в виде случайных актов. Поэтому, если рассматривать такую частицу в микроскоп, то нам будет казаться, что ее размеры, форма и другие свойства флуктуируют и не обнаруживают регулярного поведения. Реакция квантовых частиц на воздействие электрической или механической силой должна также стать неустойчивой из-за быстрого и неконтролируемого обмена квантами между объектом и соответствующим зондом. Поэтому было бы трудно решить, например, является ли исследуемый объект «твердым» или «мягким». Отсутствие непрерывности движения, связанное с быстрым и неконтролируемым изменением свойств всех частей, сделало бы затруднительным непрерывное отождествление каждой части системы с течением времени, так как части могут весьма существенно измениться между последовательными наблюдениями. Например, они могут превратиться из чего-то, напоминающего волну, во что-то, напоминающее частицу, но при этом невозможно было бы детально

проследить это превращение, как это можно было сделать при превращении бактерии в спору. Если имелось много подобных взаимодействующих частей (например, элементарных частиц), то вскоре пропала бы уверенность, что мы наблюдаем за той же частью, что и вначале.

24. Неделимое единство квантовых систем. Из сказанного выше ясно, что когда мы стремимся повысить точность описания, то классическая программа разложения изучаемой системы на части становится неосуществимой. Программа синтеза с помощью механических причинных законов тоже становится неосуществимой, так как такие точные причинные законы отсутствуют. Вместо этого мы приходим к новой точке зрения, основанной на представлении, что кванты, связывающие объект и окружающую его среду, образуют неисчезающее звено, которое в любой момент зависит в равной мере от обеих частей. Так как поведение каждой части зависит столько же от этих квант, как и от «собственных» свойств, то ясно, что ни одну из частей системы нельзя рассматривать самостоятельно.

Если бы в классическом эксперименте обнаруживалось наличие исчезающего «звена» между двумя объектами, то мы должны были бы постулировать наличие третьего объекта (звена) и, следовательно, на этот раз рассматривать старый тип описания для системы из *трех* составных частей. Однако в квантовой теории эти кванты не являются отдельными объектами, а являются лишь способом истолкования неделимых переходов уже существующих объектов. Непредсказываемость и неконтролируемость квантов может, в любом случае, предохранить от рассмотрения их как третьего объекта, так как мы не можем никаким определенным способом приписать им наблюдаемые эффекты.

25. Пример: атом водорода. Рассмотрим, например, в основном состоянии атом водорода, который взаимодействует с электромагнитным полем, обладающим некоторой энергией. Атом может поглотить квант, но в процессе перехода он не находится в определенном энергетическом состоянии. Наоборот, он относится к неопределенной области энергетических состояний. Также не определена и энергия электромагнитного поля. В процессе перехода обе системы связаны, так как они обмениваются неделимым квантом энергии, принадлежащим в равной мере электрону и электромагнитному полю. Поэтому невозможно однозначно приписать дальнейшее поведение системы состоянию каждой «части», как это можно сделать в классической физике (т. е. электрону и электромагнитным полям), потому что состояние каждой части не определено и, кроме того, сложно связано с состоянием другой части.

26. Необходимость немеханического описания. Невозможность считать квантовые системы состоящими из отдельных частей, кото-

рые взаимодействуют по причинным законам*), означает, что мы вынуждены существенно изменить общие методы описания природы. Только в классическом пределе, где влиянием отдельных квантов можно пренебречь и где их общий эффект можно приближенно описать классическими причинными законами, возможно разделить мир на независимые части. Даже в классическом пределе мы признаем, что разделение между объектом и окружающей средой является абстракцией. Но так как каждая часть взаимодействует с другими, согласно причинным законам, то этим путем можно еще получить правильное описание. Однако в системе, поведение которой существенно зависит от перехода нескольких квантов, разделение мира на части является недопустимой абстракцией, потому что сама природа частей (например, волна или частица) зависит от факторов, которых нельзя однозначно приписать ни одной части и даже подвергнуть полному контролю или предсказать.

Таким образом, исследуя применимость обычного классического критерия к разделению системы на независимые части, мы пришли к тем же выводам, которые были получены непосредственно в гл. 6, п. 13: всю вселенную при очень точном рассмотрении необходимо представлять себе как одно неделимое целое, отдельные части ее проявляются как идеализированное приближение только при классической точности описания. Это значит, что взгляд на вселенную как на гигантскую машину, преобладавший в период от XVI до XIX века, теперь оказывается лишь приближенно правильным, ибо основа структуры материи не является механической**).

Сводка новых понятий квантовой теории

Мы видели, что такие классические основные понятия, как непрерывность, причинность и возможность разложения мира на независимые части, все одновременно необходимы для согласования друг с другом. При отказе от одного из них приходится исключать рассмотрение и всех других. Таким образом, как показано в п. 20, раздел системы на независимые части имеет смысл только, если эти части движутся непрерывно и подчиняются точно определенным причинным законам. Аналогично легко показать, что понятие о точно определенных причинных законах имеет смысл только, если мир можно разделить на независимые элементы, движущиеся непрерывно.

*) Здесь опять следует указать на неудачную терминологию автора. Лучше сказать, по *механическим* или *классическим* причинным законам, так как в области микроявлений мы всегда имеем дело с закономерными причинно обусловленными явлениями, но более сложными, чем в случае макроявлений. — *Прим. ред.*

**) Это значит, что термин «квантовая механика» в значительной мере неточен. Вернее было бы говорить: «квантовая немеханика».

Без таких элементов не будет точно определяемых независимых переменных, к которым можно применить причинные законы.

Поэтому для объяснения микроявлений вся система классических понятий должна быть заменена совершенно новой системой квантово-теоретических понятий, каждое из которых имеет смысл в связи со всеми остальными. Система квантовых понятий включает предположения о неполной непрерывности, о неполном механическом детерминизме и о неделимом единстве всей вселенной. В итоге можно сказать, что свойства вещества должны быть объяснены с помощью противоположных, но дополнительных пар возможностей, каждая из которых может проявиться в более определенной форме при подходящем материальном окружении, но только за счет соответствующего уменьшения степени определенности другой (см. п. 15).

Введение новых квантовых понятий сталкивается с серьезными затруднениями, так как наша обычная терминология и наше мышление основаны на молчаливом предположении, что классические понятия по существу правильны. Такое предположение вынуждает нас интерпретировать квантотеоретические результаты в общих классических представлениях. Так, когда говорится, что в определенной области пространства находится электрон, то мы подразумеваем, что в этой области существует обособленный объект с присущими ему свойствами, которые не зависят от систем, взаимодействующих с этим объектом. Однако мы знаем, что электрон действует или как волна, или как частица в зависимости от системы, с которой он взаимодействует в такой же мере, как и от самого электрона.

Чтобы избежать упоминавшихся выше ошибок, надо решительно ввести новую терминологию. Однако в настоящее время мы можем только помнить, что общеупотребительные научные термины, как-то: «электрон», «атом», «волна» и «частица», всегда ассоциируются с классическими понятиями, которые нельзя применять без оговорок в квантовой теории. Так, слово «электрон» в квантовой теории относится к чему-то значительно менее определенному и больше зависящему от окружающей среды, чем то, что предполагалось в классическом понятии электрона. Чтобы избежать неверной интерпретации квантовой теории, связанной с трудностями терминологии, читатель должен понять теорию с помощью всей новой системы понятий. Цель этой главы и заключалась в том, чтобы указать на все изменения в совокупности используемых понятий. Содержание этой главы следует усвоить в тесной связи с содержанием гл. 6, 7, 22 и 23.

Аналогии с квантовыми процессами

Существует большая совокупность опытов, в которых происходят явления, очень сходные с квантовыми процессами. Эти аналогии имеет смысл рассмотреть здесь, так как это поможет лучше уяснить

результаты квантовой теории. Параллельно будут также приведены некоторые интересные рассуждения о причинах, обуславливающих само существование таких аналогий.

27. Соотношение неопределенностей и некоторые формы нашего мышления. Человек, пытающийся наблюдать, о чем он думает в тот самый момент, когда размышляет на какую-нибудь тему, вообще должен согласиться, что он вносит с этого времени непредсказываемые и неконтролируемые изменения в ход своих мыслей. В настоящее время неизвестно точно, почему это происходит, ниже будут приведены некоторые правдоподобные объяснения. Тесная аналогия получается, если сравнить: 1) состояние мысли в данный момент с положением частицы и 2) общее направление изменения этой мысли с импульсом частицы.

Однако надо помнить, что человек может всегда приблизительно описать, о чем он думает, не внося заметных возмущений в ход своих мыслей. Но если он пытается сделать это описание точным, то он обнаруживает, что или предмет его мыслей, или их течение, или иногда и то, и другое, начинает сильно отличаться от тех, которые были до того, как он пытался их наблюдать. Таким образом, действия, стремящиеся сделать определенной какую-то сторону процесса мышления, вносят непредсказываемые и неконтролируемые изменения в другие важные стороны этого процесса.

Дальнейшее развитие этой аналогии приводит к тому, что значимость процесса мышления начинает обнаруживать, если можно так сказать, квантовый характер. Так, если человек стремится приписать своим мыслям все более точно определенные элементы, то он в конце концов достигает состояния, когда дальнейший анализ становится бессмысленным. Поэтому, по-видимому, частично значение каждого элемента процесса мышления основано на его неисключаемых и не полностью контролируемых связях с другими элементами *). Аналогично некоторые характеристические свойства квантовой системы (например, волновая или корпускулярная природа) зависят от неисключаемой и не полностью контролируемой квантовой связи с окружающими предметами (см. пп. 24—26). Таким образом, процессы мышления и квантовые системы подобны друг другу в том отношении, что их нельзя разложить на слишком мелкие независимые элементы, так как «внутренняя» природа каждого элемента не есть свойство, существующее отдельно и независимо от других элементов, а наоборот, это свойство возникает частично из связи одного элемента с другими. В обоих случаях разложение на

*) Это аналогично зависимости части второстепенных слов от слов, с которыми они связаны. Практически эту зависимость нельзя ни полностью предсказать, ни проконтролировать (в частности, в устной речи). Действительно, вероятно, невозможно разложение *разговорного* языка на независимые элементы с точно определенным соотношением между ними.

независимые элементы правильно только, если оно настолько приближенно, что никакое заметное изменение в различных неразрывно связанных частях не будет зависеть от этого разложения.

Существует также подобие между процессами мышления и классическим пределом квантовой теории. Логический процесс соответствует наиболее общему типу процесса мышления так же, как классический предел соответствует самому общему квантовому процессу. В логическом процессе мы имеем дело с классификациями. Надо представить себе, что эти классификации совершенно разделены, но связаны законами логики, которые, возможно, аналогичны причинным законам классической физики. В любом процессе мышления составляющие представления не разделены, а текут непрерывно и неделимо. Попытка разложить их на отдельные части нарушает или изменяет их смысл. Однако существуют определенные типы понятий (в том числе и классификация предметов), для которых можно, не производя никаких существенных изменений, пренебречь неделимой и не полностью контролируемой связью с другими мыслями. Наоборот, связь можно рассматривать как причинную и следовать законам логики.

Логически определяемые понятия играют такую же фундаментальную роль в абстрактном и точном мышлении, какую играют отдельные предметы и явления в нашем обычном описании мира. Без развития логического мышления мы не имели бы ясного способа выражения результатов наших мыслей и способа проверки их правильности. Таким образом, как и жизнь была бы невозможна, если квантовая теория не имела бы своего существующего классического предела, так и мышление, как мы знаем, было бы невозможно, если бы нельзя было выразить его результаты в понятиях логики. Однако основной процесс мышления, вероятно, не может быть изображен как логический. Например, многие люди замечали, что новые идеи часто приходят внезапно, после долгих и бесполезных исканий и без видимой непосредственной причины. Мы полагаем, что если пренебречь промежуточными неделимыми нелогическими этапами, осуществляемыми в действительном процессе мышления, и ограничиться логической терминологией, то возникновение новых идей представляет тесную аналогию с квантовым скачком. Аналогичным образом, действительное понятие квантового скачка, по-видимому, необходимо в процессе описания квантовой системы, которая фактически представляет собой неделимое целое в терминах слов и понятий, предполагающих, что эта система может быть разложена на независимые части (см., например, гл. 22, п. 14).

28. Возможные причины для аналогий между мышлением и квантовыми процессами. Теперь можно спросить себя, является ли тесная аналогия между квантовыми процессами, нашими внутренними переживаниями и процессами мышления больше чем простым совпа-

дением. Здесь мы стоим на почве чистых предположений. В настоящее время очень мало известно относительно связи между процессом мышления и эмоциями и деталями структуры и работы мозга. Бор предположил, что процессы мышления включают такие маленькие количества энергии, что квантотеоретические ограничения играют уже существенную роль при определении их характера [1]. Наблюдения обнаруживают наличие огромного числа механизмов в мозгу, и следует считать, что многие из этих механизмов должны, вероятно, действовать по законам классической физики. Действительно, до настоящего времени предполагалось, что нервная система включает комбинации телефонных коммутаторов и счетных машин такой сложности, о которой раньше, вероятно, и не имели представления. Дополнительно к такому описываемому классически механизму, который, по-видимому, действует подобно общей системе электрической связи, Бор предположил, что определенные узловые пункты, контролирующие этот механизм (на которые в свою очередь влияет весь этот механизм), настолько чувствительны и тонко настроены, что их надо описывать существенно квантовомеханическим путем. (Мы можем, например, вообразить, что такие узловые пункты существуют в определенных типах нервных соединений.) Нельзя быть слишком придирчивым и считать эти соображения чистой спекуляцией.

Гипотеза Бора не противоречит чему-либо известному в настоящее время. Поэтому удивительная далеко идущая аналогия между процессами мышления и квантовыми процессами должна указывать, что гипотеза, связывающая эти два явления, может явиться весьма плодотворной. Если бы такая гипотеза могла когда-нибудь быть проверена, то она, естественно, объяснила бы многие черты нашего мышления.

Даже если бы эта гипотеза оказалась неверной и мы могли бы описать работу мозга при помощи одной лишь классической теории, аналогия между мышлением и квантовыми процессами могла бы иметь важные следствия: мы имели бы пример классической системы, которая давала бы хорошую аналогию с квантовой теорией. По крайней мере это было бы весьма поучительно. Например, это могло дать нам средства для описания эффектов, подобных квантовым явлениям, используя скрытые параметры. (Однако это не явилось бы доказательством того, что такие скрытые параметры существуют.)

Даже без каких-либо экспериментальных данных аналогия между мышлением и квантовыми процессами может быть полезна, давая нам возможность лучше «почувствовать» квантовую теорию. Например, предположим, что мы хотим детально описать движение электрона на определенном энергетическом уровне в атоме водорода. Можно сказать, что это аналогично желанию детально описать, о чем мы думаем, когда размышляем о каком-нибудь определенном предмете. Как только мы начинаем это детальное описание, мы уже больше не думаем об интересующем нас предмете, а вместо этого думаем

о том, чтобы дать детальное описание. Аналогично когда электрон движется по траектории, которую можно определить, он просто не может уже больше быть электроном с определенной энергией.

Если бы было верно, что процессы мышления существенно зависят от квантовомеханических элементов в мозгу, то можно было бы сказать, что процессы мышления дают такое же непосредственное доказательство существования квантовых явлений, какое дает мускульная сила для классической теории. Таким образом, например, догалилеевское понятие силы, полученное из непосредственных опытов с мускульной силой, было в общих чертах правильным. Однако в деталях эти представления были ошибочны, поскольку они предполагали, что не ускорение, а скорость пропорциональна силе. (Это представление в основном правильно для случая сильного трения, что и имеет место, как правило, в обычных опытах.) Мы предполагаем по аналогии, что поведение нашего процесса мышления, может быть, неявно отражает некоторые квантовомеханические стороны материи, из которой мы состоим.

Примечание редактора к гл. 8

В этой главе автор делает попытку дать физическую интерпретацию основных представлений квантовой теории. В отличие от многих «интерпретаторов» квантовой механики, он совершенно сознательно стоит на позициях материализма. Однако он не дает последовательного диалектико-материалистического анализа и поэтому в ряде случаев фактически не отступает от механистической интерпретации основного содержания квантовой механики. Автор совершенно прав, когда он подчеркивает, что в квантовой теории, в отличие от классической, гораздо глубже учитывается взаимодействие любого микрообъекта с его материальным окружением. Именно вследствие существенных связей между объектом и его окружением в области микро-явлений уже нельзя так грубо «индивидуализировать» отдельные части единой материальной системы, как это можно было делать в макроскопических масштабах с большой степенью приближения. Автор недостаточно подчеркивает, что существование двух дополняющих способов определения квантовой системы («пространственно-временного» и «причинного») связано в первую очередь с грубостью этих классических макроскопических методов, которыми можно пользоваться лишь до определенных пределов, указываемых соотношениями неопределенностей. Сами же более сложные и глубинные свойства материи, проявляющиеся в области микромасштабов, строго закономерны и причинно обусловлены. Автор повсюду придерживается неточной терминологии, называя термином «причинность» лишь наиболее простую форму последней — механическую, лапласовскую причинность. Кроме того, автор, как это видно из его последующих работ по квантовой механике [69*], считает статистический характер законов квантовой механики связанным исключительно с нашим незнанием каких-то скрытых (классически подобных) параметров. Здесь опять-таки сказывается то, что автор не использует учение диалектического материализма о неисчерпаемости материи и материальных связей, о связях коренных, динамически определяющих данное явление, для которого они суть определяющие, и о связях не основных, но всегда присутствующих и влияющих на данное явление (но не определяющих его), которые вносят элемент статистики и вероятности в законы движения микрочастиц.

Зависимость свойств микрочастицы от способа ее наблюдения или, точнее говоря, от характера ее взаимодействия с окружением и представляет собой проявление объективных материальных связей в области микроявлений. Поэтому принцип дополнительности является не основным принципом квантовой теории, как это считают сторонники механистической интерпретации, а лишь следствием ее основных законов, отражающих объективные свойства микрочастиц.

Не совсем удачна также терминология автора, когда он говорит о неконтролируемых и непредсказуемых взаимодействиях. Эта терминология относится к тому, что мы не можем классически объяснить сложные статистические закономерности микроявлений. Но в рамках тех явлений, которые составляют содержание квантовой механики, ни о какой неконтролируемости не может быть и речи. Что же касается статистики, то, как уже указывалось выше, ее появление связано с наличием неглавных и неопределяющих связей, от которых мы в масштабах микроявлений не можем отвлечься и которые должны всегда учитываться.

ГЛАВА 9

ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ, ОПЕРАТОРЫ
И УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА

На основе физической теории, развитой в первой части, мы теперь можем обратиться к математическому аппарату, с помощью которого квантовая теория излагается в точной количественной форме. Вначале будут получены формулы для средних значений любой физической величины и изложен аппарат операторов, очень удобный для выражения этих средних величин. Затем, пользуясь принципом соответствия, мы получим уравнение Шрёдингера. И, наконец, введем собственные значения операторов и их собственные функции. Сделав все это, можно перейти к части III, где излагаются применения квантовой теории к различным простым задачам.

1. Волновой формализм и вероятность. В части I было показано, что квантовая теория (в отличие от классической) может в основном предсказывать не точные результаты измерений, а только вероятные, определяемые волновой функцией $\psi(x)$. Вероятность найти координату частицы в интервале между x и $x + dx$ равна

$$P(x)dx = \psi^*(x)\psi(x)dx.$$

Вероятность того, что частица обладает импульсом, заключенным между $p = \hbar k$ и $p + dp = \hbar(k + dk)$, равна

$$P(k)dk = \varphi^*(k)\varphi(k)dk.$$

Так как только два свойства элементарной частицы, с которыми мы теперь будем иметь дело, это ее положение и импульс*), то ясно, что можно предвидеть любые черты поведения частицы, поскольку они полностью описываются волновой функцией. Это очень важный момент. В применении к системам более сложным, чем одна

*) Имеются также спин и другие свойства, но они вносят лишь небольшие поправки, которыми для наших целей можно пренебречь (см. гл. 17).

частица, это предположение обобщается: имеется волновая функция (функция всех координат, необходимых для описания системы), из которой можно получить всю возможную физическую информацию о системе. Например, в случае двух частиц волновая функция имеет вид $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, где $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ — координаты соответственно первой и второй частиц. Тогда произведение $\psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)d\tau_1 d\tau_2$ равно вероятности того, что частица 1 находится в элементе объема $d\tau_2$, в то время как частица 2 находится в элементе объема $d\tau_1$. Следовательно, для двух частиц волны движутся в шестимерном пространстве, а для N частиц — в $3N$ -мерном пространстве.

В гл. 17 будет показано, что электрон имеет спин, требующий введения спиновой координаты s . Тогда волновая функция для одного электрона принимает вид $\psi(\mathbf{r}_1, s)$. Следовательно, мы видим, что всегда, когда требуется учесть новые переменные при описании системы, можно легко представить волновую функцию как функцию и от этих новых переменных.

2. Гипотеза линейной суперпозиции. Основная идея любой волновой теории заключается в том, что если ψ_1 и ψ_2 — возможные волновые функции, то любая линейная комбинация $a\psi_1 + b\psi_2$, где a и b — произвольные постоянные, есть тоже возможная волновая функция. Это утверждение известно как гипотеза линейной суперпозиции. Такого рода гипотезу необходимо допустить, чтобы объяснить интерференцию и образование волновых пакетов. Например, в оптике интерференционные полосы часто предсказывают, пользуясь принципом Гюйгенса, согласно которому интенсивность волны в любой точке определяется как линейная суперпозиция волн, исходящих из всех возможных точек предыдущего фронта волны. Неизвестно, единственная ли это гипотеза, способная объяснить интерференцию. Однако это простейшая из всех возможных гипотез, и она успешно применяется при объяснении явлений интерференции в электромагнетизме и акустике. Распространим этот постулат также и на волны электронов. Фактически мы это уже сделали без обсуждения того, что это является постулатом, при построении волновых пакетов и при описании опытов по дифракции электронов, которые рассматривались способом, аналогичным применяемому при рассмотрении дифракции света. Большой успех этой интерпретации узаконивает ее дальнейшее применение к более общим вопросам.

Такой способ доказательства будет использован довольно часто по мере дальнейшего изложения математического аппарата квантовой теории. Путем аналогий и доводов, которые делают наши выводы правдоподобными, можно прийти к плодотворным идеям, однако при последующем исследовании их необходимо проверить, сравнивая с опытом. Мы считаем, что этот способ более удобен для начинающего при изложении квантовой теории, чем метод введения абстрактных постулатов, из которых затем получают целый ряд математических

выводов, сравниваемых с опытом. Кроме того, постулативный подход имеет еще один недостаток, заключающийся в том, что этот метод слишком строг, и поэтому с его помощью трудно показать, как надо изменить теорию в случае небольших расхождений с опытом. Подход, который мы избрали, можно назвать «эвристическим», т. е. частично основанным на выводах, а частично — на умозаключениях, которые позже можно изменить в результате более точных опытов.

3. Понятие состояния системы в квантовой теории. Как показано в п. 1, волновая функция имеет в общем случае только вероятностное истолкование. Поэтому она неоднозначно соответствует действительному поведению вещества (см. гл. 6, п. 4). С другой стороны, мы предполагаем, что волновая функция дает всю возможную информацию, относящуюся к описываемой системе. Как можно примирить эти два положения?

Сделаем это, допустив, что в общем случае свойства вещества не существуют раздельно в данном объекте в точно определенной форме. Наоборот, они представляют собой не полностью определенные возможности, принимающие более определенную форму только при взаимодействии с другими системами например с измерительной аппаратурой (см. гл. 6, пп. 9 и 13; гл. 8, п. 14). Волновая функция описывает все эти возможности и приписывает каждой из них определенную вероятность. Последняя не указывает, что данное свойство, например величина импульса, действительно существует в данный момент времени в системе, но скорее означает, что при взаимодействии с подходящей измерительной аппаратурой такая величина должна проявиться за счет соответствующего уменьшения определенности какой-либо другой переменной, в нашем примере — координаты. Поэтому для двух подобных систем, имеющих одну и ту же волновую функцию, нельзя делать вывод, что эти системы обязательно будут вести себя одинаково во всех процессах, в которых они принимают участие. Можно только установить, что эти системы обладают некоторыми возможностями и что в каждой системе данная возможность имеет одинаковую вероятность проявить себя, если обе системы одинаково исследуются (например, при измерении одной и той же переменной).

В классической физике две подобные системы могут быть поставлены в такие условия, в которых каждая из них обладает одним и тем же значением каждой из основных переменных (таких, как импульс и координата). Если это сделано, то последующее поведение обеих систем будет идентично. О таких системах вполне правильно говорить, что они находятся в одном и том же состоянии. Однако в квантовой теории не полностью определенная природа всех основных величин делает невозможным приведение двух систем в настолько подобное состояние, чтобы они вели себя совершенно оди-

наково во всех последующих процессах. Самое большее, что можно сделать, это, подобрать в каждой системе условия одинаковой вероятности для развития каждой из ее различных возможностей. Чтобы сделать это, нужно получить две системы с волновыми функциями или одинаковыми, или различающимися, самое большее, на постоянный множитель e^{ia} . (С другой стороны, фазовый множитель, зависящий от координаты, будет включать различные распределения импульса, как показано в гл. 6, п. 7.) При таких условиях две системы подобны настолько, насколько им позволяет это не полностью определенный характер их основных свойств. По этой причине о таких системах говорят, что они находятся «в одинаковом квантовом состоянии».

Как можно получить две системы, которые имели бы одну и ту же волновую функцию, т. е. находились бы в одинаковом квантовом состоянии? Пример такой операции описан в гл. 6, п. 1, где мы видели, что электроны с одинаковым импульсом, направляемые в систему щелей по одному, будут иметь одну и ту же волновую функцию (различающуюся постоянным фазовым множителем) и поэтому будут находиться в одном и том же квантовом состоянии. В более общем смысле всякий раз, когда все существенные переменные двух систем определены настолько точно, насколько позволяет принцип неопределенностей, эти системы находятся в одном квантовом состоянии. Таким образом, чтобы привести две системы в одно и то же квантовое состояние, мы должны попытаться воспроизвести начальные условия так точно, как это позволяет квантовая природа вещества.

4. Статистический смысл понятия квантового состояния. До сих пор мы применяли понятие квантового состояния только к отдельным системам. Кроме того, мы видели, что, даже когда две системы считаются подобными (насколько это позволяет их квантовая природа), они могут вести себя по-разному, потому что внутри каждой системы существует ряд не полностью определенных возможностей. Таким образом, в отдельных случаях трудно доказать, что две системы находятся в одинаковом квантовом состоянии, если только это состояние нельзя не описать с помощью определенной величины, связанной с некоторой переменной.

Если, например, волновая функция равна точно $e^{ipx/\hbar}$, то импульс совершенно определенно равен p . Поэтому мы можем быть уверены, что две системы имеют одинаковую волновую функцию, если каждая из них имеет определенные и одинаковые импульсы. Но в общем случае мы имеем волновой пакет, включающий ряд как возможных импульсов, так и возможных координат, которые могут проявиться при измерении какой-либо из этих переменных. В этом случае тот факт, что система находится в данном квантовом состоянии, обычно можно показать лишь статистическим путем.

Например, можно направить электроны с заданными близкими по величине импульсами в систему щелей, как описано в гл. 6, п. 2. Тогда на экране справа от щелей будет целая область возможных точек попадания каждого электрона. Но в любом данном случае волновая функция ψ , следовательно, квантовое состояние не определяет точно, куда именно попадет частица. Только после большого числа подобных экспериментов при одинаковых начальных условиях мы получим статистическую картину (распределение) координат электронов, которая характерна, для волновой функции ψ , следовательно, для квантового состояния.

Аналогично, если мы измерим импульсы электронов после их прохождения через систему щелей, то получим распределение импульсов, определяемое компонентами Фурье волновой функции ψ , следовательно, квантовым состоянием. В более общем смысле только при одинаковых начальных условиях получается распределение, определяемое квантовым состоянием. В некоторых случаях это распределение может быть таким узким, что в первом приближении можно говорить о точно определенном результате, в частности, если исследуемое явление не зависит решающим образом от точной величины измеряемой переменной. Такое положение вещей всегда имеет место в классическом пределе (т. е. в случае, когда можно пренебречь распылением волнового пакета), так что приближенно можно говорить о точно определенных величинах *всех* основных переменных и таким образом получить определение классического состояния.

В общем случае статистические измерения в квантовой области должны проводиться в ансамблях подобных систем, каждая из которых подвергается одному и тому же начальному воздействию. Это необходимо потому, что в процессе измерений имеются неконтролируемые изменения *), вызывающие новое квантовое состояние, которое не определяется состоянием, существовавшим до взаимодействия с измерительной аппаратурой. Поэтому, если мы хотим отнести наши данные к заданному квантовому состоянию, то нужно считать каждую систему после измерения прекратившей свое существование и начинать работать с новой системой, полученной тем же путем.

5. Математическое выражение для средних величин. Теперь применим математический аппарат, который наиболее точным путем отражает вышеуказанные положения. Начнем с вопроса о получении выражений для различных важных физических величин.

Среднее значение функции координат. Среднее значение x , по определению, должно быть равно

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x P(x) dx. \quad (9.1)$$

*) См. обсуждение соотношений неопределенностей в гл. 5.

Так как мы видели, что

$$P(x) = \psi^*(x) \psi(x),$$

то можно написать *)

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx. \quad (9.2)$$

Величина x должна быть поставлена между ψ^* и ψ по мотивам симметрии в написании формул, смысл которой будет выяснен ниже.

Подобным образом средние значения любой функции от x могут быть выражены как

$$\bar{f}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) f(x) \psi(x) dx. \quad (9.3a)$$

Можно непосредственно обобщить этот аппарат на три измерения

$$\bar{f}(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* f(x, y, z) \psi d\tau. \quad (9.3b)$$

где $d\tau$ — элемент объема.

Далее для краткости мы будем везде ограничиваться одномерной записью, так как во всех случаях будет также прост переход к трем измерениям.

Среднее значение функции импульса. Среднее значение импульса равно

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} p P(p) dp = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p) p \Phi(p) dp, \quad (9.4a)$$

где $\Phi(p)$ — нормированная компонента Фурье функции $\psi(x)$ с $p = \hbar k$.

*) Отметим, что ψ всегда считается нормированной, так как полная вероятность нахождения частицы где-нибудь в пространстве равна 1, т. е.

$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 1$. Если ψ еще не нормирована, то ее можно пронормировать

умножением на постоянную константу A так, чтобы $|A|^2 \int \psi^* \psi dx = 1$.

В части I было показано, что полная вероятность сохраняется. Следовательно, если волновая функция вначале нормирована, она остается нормированной все время.

В гл. 4 и 10 было показано, что если $\psi(x)$ нормирована, то $\varphi(k)$ тоже автоматически нормирована, т. е.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(k) \varphi(k) dk = 1.$$

Однако часто удобно вводить функции $\Phi(p)$, которые нормированы, так что

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p) \Phi(p) dp.$$

Это условие удовлетворяется, если принять

$$\varphi(k) = (\hbar)^{1/2} \Phi(p).$$

Задача 1. Доказать вышеуказанное утверждение.

Для любой функции импульса среднее значение дается выражением

$$\overline{f(p)} = \int_{-\infty}^{\infty} f(p) P(p) dp = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p) f(p) \Phi(p) dp. \quad (9.46)$$

Критерий пригодности волновых функций. Основное условие, которому должна удовлетворять любая функция ψ , заключается в том, что квадрат ее модуля должен быть интегрируем, т. е.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = \text{конечному числу}.$$

Если это условие не соблюдается, то нельзя даже нормировать вероятность, т. е. через волновую функцию невозможно представить средние значения наблюдаемых физических величин. Поэтому необходимое (но не достаточное) требование к ψ заключается в следующем: $\psi \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm \infty$ и $\Phi(p) \rightarrow 0$ при $p \rightarrow \pm \infty$.

Однако можно получить более строгие физические требования из необходимости существования средних значений всех наблюдаемых физических величин. Очевидно, что x и p — наблюдаемые физические величины, поэтому должны существовать их средние значения. Кинетическая энергия $T = p^2/2m$ — тоже наблюдаемая величина. Поэтому мы можем задать условие для волновой функции, что должен сходиться интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} \Phi^* p^2 \Phi dp$. Тогда необходимым (но не достаточным) условием для $\Phi(p)$ является $p \Phi(p) \rightarrow 0$ при $p \rightarrow \pm \infty$. Если известно, что существуют потенциальные энергии в виде $V(x)$, то

также необходимо существование $\bar{V}(x)$. Повторяем, что во всех случаях, когда известна физическая важность данной функции, мы требуем от всех подходящих волновых функций существования среднего значения этой величины.

В дальнейшем мы увидим, что практически для всех обычно встречающихся волновых функций существует $\overline{x^n}$, где n — произвольное положительное число *).

Дальнейшие ограничения для поведения приемлемых волновых функций будут получены в следующем пункте этой главы.

6. Операторы для вычисления средних значений импульса из интегралов в пространстве координат. Было бы очень полезно уметь вычислять средние значения функций импульса непосредственно с помощью $\psi(x)$, не прибегая к разложению волновых функций в ряд Фурье. Чтобы выяснить, как это можно сделать, выразим $\Phi(p)$ в уравнении (9.4а) через интеграл Фурье

$$\Phi(p) = (\hbar)^{-1/2} \varphi(k) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \psi(x) dx.$$

Мы получаем (учитывая равенство $p = \hbar k$)

$$\bar{p} = \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx'} \psi^*(x') k e^{-ikx} \psi(x) dx' dx dk. \quad (9.5a)$$

Произведем замену

$$k e^{-ikx} = i \frac{\partial}{\partial x} e^{-ikx}.$$

Тогда интеграл превращается в

$$\bar{p} = \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx'} \psi^*(x') dx' \left[i \frac{\partial}{\partial x} e^{-ikx} \right] \psi(x) dx dk. \quad (9.5б)$$

Интегрирование по частям по x с учетом того, что $\psi(\pm\infty) = 0$, дает

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x') \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} dx' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} e^{ik(x'-x)} dk. \quad (9.5в)$$

*) Это следует из того, что для связанных состояний $\psi(x) \rightarrow e^{-C|x|}$ при $x \rightarrow \pm\infty$. В то же время для свободных частиц всегда можно считать, что система эквивалентна системе, заключенной в очень большой ящик, поэтому вне этого ящика волновая функция исчезает и интегралы, содержащие x^n , сходятся (см. гл. 10, п. 20).

С помощью теоремы об обращении интеграла Фурье, получаем

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} dx. \quad (9.5r)$$

Теперь мы имеем $\bar{p}$, выраженное через $\psi(x)$ и $\psi^*(x)$. Формально результат кажется подобным результату для x , за тем исключением, что число x под интегралом заменено дифференциальным оператором $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. Следовательно, если нужно найти $\bar{p}$, это можно сделать с помощью волновой функции, выраженной как функция координат, причем мы заменяем величину p оператором $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, как в уравнении (9.5g). Эта замена чисел на операторы — всего лишь формальная операция. Однако она чрезвычайно полезна, так как создает математический аппарат, весьма напоминающий формулы для вычисления средних величин в классической физике, за тем исключением, что операторы заменяют определенные типы чисел. Теперь становится ясным, почему в формуле (9.2) x было поставлено между ψ^* и ψ .

С помощью этого математического аппарата можно более детально выяснить, почему $\psi(x)$ представляет собою нечто большее, чем волна вероятности. Не только средняя величина x определяется выражением

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx, \text{ но и средняя величина } p \text{ равна}$$

$$\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx.$$

Следовательно, характер зависимости амплитуды волны от координаты (т. е. ее производная) тоже имеет физический смысл. Даже когда $\psi^* \psi$ равно постоянной величине, например если $\psi = e^{ikx}$, производная $\partial \psi / \partial x$ никоим образом не равна нулю. Таким образом, мы видим, что волновая функция означает больше чем величину, определяющую только вероятность данной координаты, так как ее производная определяет среднюю величину импульса.

7. Функции импульса. Если мы имеем функцию импульса, которую можно выразить в виде степенного ряда $f(p) = \sum C_n p^n$, то легко показать с помощью рассуждения, аналогичного тому, которое применялось в случае с $\bar{p}$, что

$$\bar{f}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left[\sum C_n \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \right] \psi(x) dx. \quad (9.6)$$

Для справедливости этого результата необходимо, чтобы существовало $\bar{p}^n$ для любого n и чтобы вышеуказанные ряды сходились. Эти условия удовлетворяются для большинства волновых функций и операторов, с которыми мы будем иметь дело, но когда они не удовлетворяются, невозможно выразить $f(p)$ непосредственно через функции $\psi(x)$. Вместо этого мы должны использовать уравнение (9.46) для $f(p)$.

Поэтому правило для вычисления любой функции p заключается в том, чтобы действовать оператором $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ столько раз, какова степень p в члене, значение которого вычисляется.

Задача 2. Доказать применимость уравнения (9.6) для вычисления $\bar{p}^2$ и методом индукции распространить это на случай $\bar{p}^n$.

При выводе уравнения (9.6) надо принять во внимание, что $\frac{\partial^n \psi}{\partial x^n} \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$ для любых значений n . Для всех волновых функций, которые до сих пор применялись в связи с любыми реальными задачами, это требование удовлетворялось. Однако если появляются волновые функции, для которых это требование не удовлетворяется, то правило вычисления $\bar{p}^n$ из $\int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx$ уже далее не применимо. Так как сходимость интеграла $\int \psi^* \frac{\partial^n \psi}{\partial x^n} dx$ значительно упрощает теорию, то удобно принять условие $\frac{\partial^n \psi}{\partial x^n} \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm \infty$ как постулат, до тех пор пока не возникнут серьезные экспериментальные доводы против него.

8. Операторы в пространстве импульсов. Импульсное представление. Когда мы работаем с $\psi(x)$, то имеем дело с так называемым *координатным представлением*. Часто удобнее иметь дело с функцией $\varphi(k)$, которая в конечном счете определяет волновую функцию так же эффективно, как и функция $\psi(x)$. Если дана функция $\varphi(k)$, то волновая функция имеет так называемое *импульсное представление*.

В пространстве импульсов импульс выражается как простое число

$$p = \hbar k,$$

так же как и в координатном пространстве координата x выражается как число. Таким образом,

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p) p \Phi(p) dp. \quad (9.4a)$$

С другой стороны, легко показать, используя разложение в ряд Фурье, что средняя величина x равна следующему интегралу:

$$\bar{x} = -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p) \frac{\partial \Phi(p)}{\partial p} dp. \quad (9.7)$$

(Обратите внимание на знак минус.)

Задача 3. Доказать вышеуказанное положение.

Таким образом, по аналогии с вычислением $\bar{p}$ в пространстве x имеем

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(k) i \frac{\partial}{\partial k} \varphi(k) dk. \quad (9.8a)$$

Если $f(x) = \sum A_n x^n$, то можно показать подобным же образом, что

$$\bar{f}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(k) \left[\sum A_n \left(i \frac{\partial}{\partial k} \right)^n \right] \varphi(k) dk. \quad (9.8b)$$

Следовательно, x или p представляются в виде дифференциального оператора, зависящего от того, какое пространство используется — координатное или импульсное. Которое из двух представлений мы используем — целиком дело удобства.

Задача 4. Доказать уравнение (9.8b) и установить условия его применимости.

9. Линейность операторов. Операторы, употреблявшиеся до сих пор, обладают свойством, именуемым линейностью. Оператор O является линейным, если соблюдаются следующие условия:

- 1) Действие оператора O на *любую* волновую функцию приводит к новой волновой функции, обычно не к той же, т. е. $O\psi_1 = \psi_2$.
- 2) $O(\psi_1 + \psi_2) = O\psi_1 + O\psi_2$.
- 3) $CO\psi = OC\psi$, где C — произвольная константа. Можно легко проверить, что все употреблявшиеся до сих пор операторы обладают свойством линейности.

10. Координата x как оператор. В координатном представлении x выражается как число. Однако его можно рассматривать также и как оператор, обладающий особенно простым свойством — умножать волновую функцию на число. Очевидно, что x — линейный оператор.

В пространстве импульсов $p = \hbar k$ имеет точно те же свойства, что x в координатном пространстве.

11. Умножение операторов. Коммутаторы. Теперь мы можем рассмотреть умножение двух операторов. Мы уже имели дело

с использованием степеней p и степеней x . Что же можно сказать о произведениях типа xp или $x^n p^m$?

Действие оператора xp на $\psi(x)$ имеет следующий смысл: сначала берется $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x}$, а затем результат умножается на x . Оператор $px\psi$ означает, что мы сначала умножим ψ на x , а результат дифференцируем. Ясно, что это разные случаи. Действительно, имеем

$$(xp - px)\psi = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) \right) = i\hbar\psi. \quad (9.9)$$

$(xp - px)$ называется *коммутатором* двух операторов x и p . Коммутатор координат и импульсов удовлетворяет простому соотношению $(xp - px) = i\hbar$. Отметим, что в силу их некоммутативности операторы не являются числами. Они имеют все свойства чисел, кроме этого. Итак, их можно складывать, вычитать, умножить на постоянную величину и друг на друга, но при перемножении друг на друга в общем случае не соблюдается правило $ba = ab$, которому удовлетворяют числа.

Задача 5. Найти коммутаторы $(x^n p^m - p^m x^n)$ и $(e^{ikx} p - p e^{ikx})$.

12. Операторная форма функций общего вида. Итак, мы получили метод вычисления средних значений любой функции x и любой функции p . Но представим себе, что мы хотим получить среднее значение какой-либо функции типа xp , зависящей одновременно и от x , и от p . Ясно, что это можно сделать в координатном представлении, применив наше правило и заменив p оператором $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, так же как мы поступали, имея дело только с $f(p)$. Таким образом, попробуем записать

$$\overline{xp} \stackrel{?}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx. \quad (9.10a)$$

Аналогично в импульсном представлении можно заменить x на $i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$ и записать

$$\overline{xp} \stackrel{?}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p) \left(i \frac{\partial}{\partial p} p \right) \Phi(p) dp. \quad (9.10b)$$

Минимальное требование, которому должно удовлетворять такое приближенное правило, заключается в том, чтобы оно давало правильные средние величины в классическом пределе. Другими словами, оно должно удовлетворять принципу соответствия. Покажем, что это так и есть, для этого рассмотрим волновую функцию ψ ,

принимающую форму волнового пакета. До тех пор пока рассматриваются классические результаты, ни одно важное физическое свойство внутри пакета не может заметно измениться. Это обусловлено тем, что в классическом пределе пакет по существу имеет вид частицы, и если систему надо описать классически, то специфические волновые свойства пакета не играют роли. Следовательно можно пренебречь всеми изменениями x внутри пакета и заменить x на $\bar{x}$, считая последнее существенно постоянным. Это означает, что $\bar{p}$ можно вычислить по обычному правилу, выраженному уравнением (9.4а). Следовательно, мы видим, что наше приближенное правило дает, по крайней мере в классическом пределе, верный результат. Путем аналогичных рассуждений можно прийти к тому же выводу и для импульсного представления.

Вышеуказанное приближенное правило легко обобщается на любую функцию x и p , которую можно представить в виде степенного ряда относительно x и p . Для этого (в координатном представлении) мы везде заменяем число p на оператор $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. В итоге имеем

$$f(x, p) = \sum_{m, n} A_{nm} x^n p^m \rightarrow \sum_{n, m} A_{nm} x^n \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^m$$

и

$$\bar{f}(x, p) \stackrel{?}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \sum_{n, m} A_{nm} x^n \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^m \psi(x) dx. \quad (9.10в)$$

Определение операторов, которые нельзя представить в виде степенных рядов, разбирается ниже.

13. Вещественность средних значений и порядок сомножителей. Хотя вышеуказанное правило дает верные классические пределы для средних величин $f(x, p)$, оно иногда имеет неоднозначный смысл, так как порядок, в который входят операторы x и p , весьма существен, в то время как в соответствующем классическом выражении этот порядок неважен. Мы покажем сейчас, что эта неоднозначность частично устраняется требованием, что среднее значение любой вещественной функции x и p должно быть вещественным при произвольной ψ .

Легко показать, например, что среднее значение $\overline{xp}$, определенное выше, не вещественно. Для этого вычислим интеграл

$$\overline{xp} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx. \quad (9.11а)$$

Интегрирование по частям дает (заметим, что внеинтегральный член исчезает)

$$\overline{xp} = -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\partial}{\partial x} (x\psi^*) dx = -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi^* \psi + \psi x \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx. \quad (9.116)$$

Второй член правой части этого выражения равен комплексно сопряженному $\overline{xp}$. Следовательно, $\overline{xp}$ равно своему комплексно сопряженному плюс аддитивный член; это означает, что $\overline{xp}$ не может быть вещественной величиной.

14. Эрмитовские операторы. Чтобы исключить из рассмотрения такие сложные средние значения для величин, которые в основе своей вещественны, мы потребуем, как уже было установлено, вещественности определяемого среднего значения при произвольной функции ψ . Если $O(p, x)$ — рассматриваемый оператор, то мы требуем равенства его среднего значения $\overline{O}$ своему комплексно сопряженному. По определению, имеем

$$\overline{O} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) O \psi(x) dx. \quad (9.12)$$

Для нахождения комплексно сопряженного от $\overline{O}$ берем комплексно сопряженные от всех частей интеграла в (9.12). Следовательно, требование вещественности эквивалентно следующему условию:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) O \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) O^* \psi^*(x) dx. \quad (9.13)$$

Оператор O^* означает комплексно сопряженный оператору O . Например, для оператора $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ получаем $p^* = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. Операторы, удовлетворяющие условию (9.13), называются *эрмитовскими*.

Легко показать, что p — эрмитовский оператор. Для этого пишем

$$\overline{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx. \quad (9.14a)$$

Интегрирование по частям и исчезновение внеинтегрального члена дает

$$\overline{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx. \quad (9.146)$$

Мы видим, что $\bar{p}$ равно своему комплексно сопряженному, и следовательно, p является эрмитовским оператором.

Задача 6. Показать, что p^n и, следовательно, $f(p) = \sum A_n p^n$ являются эрмитовскими операторами при условии вещественности всех A_n . Показать, что если любое из A_n комплексное, то $f(p)$ — неэрмитовский оператор.

Задача 7. Показать, что $f(x)$ — эрмитовский оператор, если $f(x) = \sum A_n x^n$ и все A_n вещественны. Показать, что если любое из A_n комплексное, то $f(x)$ — неэрмитовский оператор.

Задача 8. Показать, что если $\frac{\partial^n \psi}{\partial x^n}$ не стремится к нулю при $x \rightarrow \pm \infty$, то оператор $\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^{n+1}$ не обязательно эрмитовский.

Из задач мы видим, что требование вещественности средних значений автоматически удовлетворяется для любой вещественной функции от x или от p . С другой стороны, оно не обязательно удовлетворяется для функций, зависящих одновременно от x и p . Покажем, что для удовлетворения условия вещественности в общем случае необходимо брать среднее из двух возможных порядков сомножителей, в каких могут появляться x и p в произведении. Рассмотрим, например,

$$\left(\frac{\overline{xp + px}}{2}\right) = \frac{\hbar}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(x \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} x\right) \psi dx. \quad (9.15a)$$

Интегрирование по частям $\int \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} dx$ дает (внеинтегральный член исчезает) — $\int \psi \frac{\partial}{\partial x} (x \psi^*) dx$, в то время как интегрирование $\int \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (x \psi) dx$ дает — $\int \psi x \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx$. Итак, мы получаем

$$\left(\frac{\overline{xp + px}}{2}\right) = -\frac{\hbar}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi \left(x \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} x\right) \psi^* dx. \quad (9.156)$$

Следовательно, мы доказали, что $\frac{\overline{xp + px}}{2}$ равно своему комплексно сопряженному и, следовательно, оператор эрмитовский.

Задача 9. Доказать, что оператор $\sum A_{nm} \left(\frac{p^n x^m + x^m p^n}{2}\right)$ эрмитовский, если все A_{nm} вещественны.

15. Видоизмененное правило вычисления средних значений $f(x, p)$. Теперь можно дать более определенное правило для нахождения средних значений любой функции от x и p . Мы не

только заменяем p на оператор $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, но и устраняем неоднозначность в расположении сомножителей, взяв среднее для двух возможных порядков сомножителей x и p . Для этого всегда записываем функцию так, чтобы все множители, включающие p , собирались вместе, как и множители, включающие x . Затем заменяем $p^n x^m$ на $\frac{1}{2}(p^n x^m + x^m p^n)$. Таким путем оператор превращается в эрмитовский, и все средние величины, найденные с его помощью, будут безусловно вещественными. Эта операция называется *приведением оператора к эрмитовскому виду* (эрмитизация оператора).

Изложенный выше путь, при котором все множители p и все множители x группируются вместе перед эрмитизацией оператора, допускает еще некоторый произвол. Так, чтобы найти квантовомеханический аналог классического произведения $(px)^2$, можно взять $\frac{p^2 x^2 + x^2 p^2}{2}$ или $\left(\frac{xp + px}{2}\right)^2$.

Задача 10. Показать, что два указанных допущения не дают одинаковых результатов, но что результаты различаются на величину порядка $\hbar^2$.

Таким образом, остается еще некоторая неоднозначность в определении квантовомеханических операторов при вычислении средних значений. Результаты различных определений отличаются на величину порядка $\hbar^2$, что имеет значение только при точных квантовомеханических расчетах. Поскольку здесь мы пытаемся построить последовательную теорию, ограниченную только тем требованием, чтобы при больших значениях квантовых чисел она правильно отражала классическое поведение системы, то ясно, что используемая процедура выбора операторов недостаточно определена для устранения этой неоднозначности. Напротив, как упоминалось выше, мы рассматриваем этот подход как нечто эвристическое в том смысле, что он приводит к теории, в общем правильной, но с отдельными деталями, нуждающимися далее в уточнении путем прямого сравнения с опытом. Однако дальнейшие изменения могут лишь вносить поправки величиной порядка $\hbar$ в некоторой степени.

В настоящее время нет экспериментальной основы для того, чтобы решить, какой из различных возможных способов расположения множителей правилен. Это объясняется просто тем, что не найдено систем, для которых предсказанные результаты зависят от принятого расположения множителей, так как до сих пор все наблюдаемые величины рассчитывались с помощью средних значений эрмитовских операторов. При полном отсутствии опытных данных мы избираем порядок, указанный в задаче 9, потому что он приводит к простейшим математическим выражениям. Пока не будет найден эксперимент, для которого предсказанные результаты будут

зависеть от способа приведения к эрмитовскому виду, невозможно решить, какой из них правилен.

16. Эрмитовски сопряженные операторы. Мы видели из предыдущего обсуждения, что в общем случае неэрмитовский оператор дает комплексное среднее значение до тех пор, пока он не будет эрмитизован, т. е. порядок, в котором входят сомножители x и p , должен быть изменен и взята полусумма их произведений. Тем не менее часто удобно иметь дело чисто математическим путем с неэрмитовскими операторами. Такой неэрмитовский оператор можно рассматривать как вид оператора, подобный комплексному числу. Для любого комплексного числа $C = a + ib$ можно определить комплексно сопряженное число $C^* = a - ib$. Можно ли определить сопряженный оператор подобным путем? Кажется естественным потребовать для оператора, сопряженного любому оператору O , чтобы его среднее значение являлось комплексно сопряженным среднему значению самого оператора O . Точнее, если обозначить оператор, сопряженный O , через O^+ , то необходимо, чтобы

$$\int \psi^* O^+ \psi dx = \int (\psi O^* \psi^*) dx. \quad (9.16)$$

Из этого определения видно, что если O — эрмитовский оператор, то $O^+ = O$. Другими словами, в соответствии с нашим определением эрмитовский оператор является самосопряженным оператором. Это напоминает вещественное число, являющееся комплексно сопряженным самому себе.

Заметим, что в общем случае O^+ не равно O^* , полученному простой заменой каждого i в операторе O на $-i$. Например, рассмотрим эрмитовский оператор

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x},$$

следовательно, $p^+ = p$. Но

$$p^* = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = -p,$$

поэтому $p^+ \neq p^*$. Чтобы отличить O^+ от O^* , мы назовем первый как эрмитовски сопряженный оператору O . Его можно назвать также комплексно присоединенным к оператору O .

Возникает вопрос, почему мы определяем сопряженный оператор таким специфическим путем. Дело в том, что физический смысл имеет только среднее значение оператора. Следовательно, ближайший квантовый аналог комплексной функции — это оператор, имеющий комплексные средние значения. Однако появление комплексных чисел в самом операторе не играет особой роли. Например, в координат-

ном представлении оператор p дается выражением $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, но его среднее значение всегда вещественно. Итак, оператор, который выражается комплексно сопряженной функцией в классическом пределе, не обязательно комплексно сопряженный оператор, но в общем случае эрмитовски сопряженный.

Важным вопросом является, всегда ли возможно найти оператор, удовлетворяющий нашему определению эрмитовски сопряженного, если мы имеем дело с произвольным оператором O ? Да, это всегда возможно. Опуская здесь доказательство, просто укажем, что оно существует.

Задача 11. Показать интегрированием по частям, что $(xp)^+ = px$.

Из произвольного оператора O всегда можно построить эрмитовский оператор, взяв среднее значение между оператором и эрмитовски сопряженным ему оператором. Тогда мы имеем

$$\frac{O + O^+}{2} = H, \quad (9.17)$$

где H — эрмитовский оператор, что ясно из равенства $(O^+)^+ = O$. Это представляет собой близкую аналогию нахождению вещественной части комплексного числа C по формуле $a = \frac{C + C^*}{2}$.

Есть ли аналогия для мнимой части b комплексного числа, равной $b = \frac{C - C^*}{2i}$? Чтобы выяснить это, рассмотрим оператор A , определяемый как

$$A = \frac{O - O^+}{2} \quad (9.18)$$

и

$$A^+ = \frac{O^+ - (O^+)^+}{2} = \frac{O^+ - O}{2}. \quad (9.19)$$

Итак, оператор A обладает свойством $A^+ = -A$ или, другими словами, он равен эрмитовски сопряженному ему оператору с обратным знаком. Такой оператор называется *антиэрмитовским*.

Из любого антиэрмитовского оператора A всегда можно получить эрмитовский оператор умножением на i . Для доказательства этого отметим сначала, что само i представляет собой антиэрмитовский оператор, это видно из его средней величины

$$\bar{i} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* i \psi dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* i^* \psi dx. \quad (9.20)$$

(Заметим, что $i^* = -i$.)

Задача 12. Доказать, используя полученные выше результаты, что $i(O - O^+) - \text{эрмитовский оператор.}$

Обозначим эрмитовский оператор $\frac{O - O^+}{2i}$ символом B . Тогда получаем

$$O = \left(\frac{O + O^+}{2} \right) + i \left(\frac{O - O^+}{2i} \right) = H + iB.$$

Итак, мы разложили произвольный оператор на два слагаемых, одно из которых имеет вещественное среднее значение, а другое — мнимое. Это совершенно аналогично числовому выражению $C = a + ib$. Отметим, однако, что H и B не обязательно коммутируют, и поэтому такое разложение не полностью эквивалентно тому, что происходит с числами. Например, для чисел имеем

$$(a + ib)(a - ib) = a^2 + b^2,$$

а для операторов

$$(H + iB)(H - iB) = H^2 + B^2 + i(BH - HB).$$

17. Обобщенное определение эрмитовского оператора. Рассмотрим эрмитовский оператор H , удовлетворяющий уравнению

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi (H^* \psi^*) dx \quad (9.21)$$

для произвольной функции ψ . Положим $\psi = \psi_1 + \psi_2$, где ψ_1 и ψ_2 — произвольные функции. Получаем

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1^* H \psi_1 + \psi_2^* H \psi_2) dx + \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1^* H \psi_2 + \psi_2^* H \psi_1) dx = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1 H^* \psi_1^* + \psi_2 H^* \psi_2^*) dx + \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1 H^* \psi_2^* + \psi_2 H^* \psi_1^*) dx. \end{aligned} \quad (9.22a)$$

С помощью формулы (9.21), которая позволяет исключить первые интегралы, получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1^* H \psi_2 - \psi_2 H^* \psi_1^*) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1 H^* \psi_2^* - \psi_2^* H \psi_1) dx. \quad (9.22b)$$

Это соотношение должно быть справедливым для произвольных ψ_1 и ψ_2 , следовательно, оно справедливо, если мы умножим ψ_1 на постоянный множитель e^{ia} , а ψ_2 — на e^{ib} . Тогда получаем

$$e^{i(b-a)} \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1^* H \psi_2 - \psi_2 H^* \psi_1^*) dx = e^{i(a-b)} \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_1 H^* \psi_2^* - \psi_2^* H \psi_1) dx. \quad (9.22b)$$

Это соотношение остается справедливым для произвольных a и b только в том случае, если вышеуказанные интегралы равны нулю. Итак, мы получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* H \psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 H^* \psi_1^* dx. \quad (9.23)$$

Это существенный результат. Он говорит о том, что для любого интеграла типа

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* H \psi_2 dx$$

можно получить тот же результат (если H —эрмитовский оператор), подействовав оператором H^* на ψ_1^* , даже если ψ_1 и ψ_2 различны. Наше первоначальное определение (уравнение (9.13)) позволяло сделать это только, если ψ_1 и ψ_2 были одинаковы.

18. Обобщенное определение эрмитовски сопряженных операторов. Если оператор O неэрмитовский, то можно обобщить определение эрмитовски сопряженного оператора подобным же образом. Положим

$$O = A + iB,$$

где A и B —эрмитовские операторы. Тогда

$$O^+ = A^+ - iB^+ = A - iB,$$

так как $i^+ = -i$ и i коммутирует с B .

Теперь рассмотрим интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* O^+ \psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* (A - iB) \psi_2 dx. \quad (9.24a)$$

Так как A и B —эрмитовские операторы, то

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* (A - iB) \psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 (A^* - iB^*) \psi_1^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 O^* \psi_1^* dx, \quad (9.24b)$$

и, следовательно,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* O^+ \psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 O^* \psi_1^* dx. \quad (9.25)$$

Это означает, что если O^+ действует на функцию справа, то можно вычислить тот же интеграл, подействовав оператором O^* на функцию слева.

19. Определение оператора, эрмитовски сопряженного произведению двух операторов. Пусть даны два оператора A и B и их эрмитовски сопряженные операторы A^+ и B^+ ; спрашивается, чему тогда равен оператор, эрмитовски сопряженный их произведению AB ? Для определения этой величины напомним по определению (уравнение (9.25)), что

$$\int \psi_1^* (AB)^+ \psi_2 dx = \int \psi_2 (A^* B^*) \psi_1^* dx. \quad (9.26a)$$

Заметим, что $B\psi_1$ — новая волновая функция, которую можно обозначить через φ . Тогда получаем

$$\int \psi_1^* (AB)^+ \psi_2 dx = \int \psi_2 A^* \varphi^* dx. \quad (9.26b)$$

Применение определения эрмитовски сопряженного оператора дает

$$\int \psi_2 A^* \varphi^* dx = \int \varphi^* A^+ \psi_2 dx = \int (B^* \psi_1^*) (A^+ \psi_2) dx. \quad (9.26b)$$

Положив $A^+ \psi_2 = f$, имеем

$$\int (B^* \psi_1^*) (A^+ \psi_2) dx = \int f B^* \psi_1^* dx = \int \psi_1^* B^+ f dx = \int \psi_1^* B^+ A^+ \psi_2 dx. \quad (9.26г)$$

Итак, мы получили

$$\int \psi_1^* (AB)^+ \psi_2 dx = \int \psi_1^* B^+ A^+ \psi_2 dx, \quad (9.27a)$$

или, следовательно, что

$$(AB)^+ = B^+ A^+. \quad (9.27б)$$

Если A и B — эрмитовские операторы, то

$$(AB)^+ = BA. \quad (9.27в)$$

Заметим, что даже если A и B по отдельности — эрмитовские операторы, то их произведение не обязательно — эрмитовский оператор.

Задача 13. Какое соотношение должно существовать между B и A для того, чтобы AB было эрмитовским оператором, если A и B по отдельности — эрмитовские операторы?

20. Применение к коммутаторам. Если A и B — эрмитовские операторы, то ясно, что оператор, эрмитовски сопряженный их коммутатору, равен

$$(AB - BA)^+ = (BA - AB) = -(AB - BA).$$

Итак, коммутатор двух эрмитовских операторов — антиэрмитовский оператор. Чтобы сделать коммутатор эрмитовским, надо умножить его на i . Тогда $i(BA - AB)$ является эрмитовским оператором.

Задача 14. Показать прямым расчетом, что $i(p^2x - xp^2)$ — эрмитовский оператор.

21. Теорема для эрмитовских операторов. Докажем теперь следующую теорему, которая понадобится позднее: если среднее значение эрмитовского оператора H равно нулю для произвольного ψ , то $H\psi$ должно быть тождественно равно нулю для всех ψ . Это означает, что $H \equiv 0$.

Чтобы доказать это, начнем с определения $\bar{H}$:

$$\bar{H} = \int \psi^* H \psi dx = 0. \quad (9.28)$$

Запишем теперь $\psi = \psi_1 + \psi_2$, где ψ_1 и ψ_2 произвольны:

$$\bar{H} = \int \psi_1^* H \psi_1 dx + \int \psi_2^* H \psi_2 dx + \int \psi_1^* H \psi_2 dx + \int \psi_2^* H \psi_1 dx = 0. \quad (9.29a)$$

Заметим, что по определению первые два члена равны нулю, следовательно,

$$\int \psi_1^* H \psi_2 dx + \int \psi_2^* H \psi_1 dx = 0. \quad (9.29b)$$

Так как это соотношение справедливо для произвольного ψ_1 , то ψ_1 можно заменить на $e^{ia}\psi_1$, где a — постоянная, тогда

$$e^{-ia} \int \psi_1^* H \psi_2 dx = -e^{ia} \int \psi_2^* H \psi_1 dx. \quad (9.29b')$$

Это может быть справедливо для произвольного a только, если каждый интеграл равен нулю. Таким образом, для произвольных ψ_1 и ψ_2 получаем

$$\int \psi_1^* H \psi_2 dx = 0. \quad (9.29g)$$

Мы можем выбрать $\psi_1 = H\psi_2$, тогда

$$\int (H^* \psi_2^*) (H \psi_2) dx = 0. \quad (9.29d)$$

Но подынтегральное выражение в (9.29d) является абсолютным значением функции $H\psi_2$, следовательно, по определению оно равно повсюду нулю или положительному числу. Поэтому интеграл в (9.29d) может быть равен нулю только, если $H\psi_2 = 0$ для всех ψ_2 , или, другими словами, при $H \equiv 0$.

Общий вывод об операторах в квантовой механике

Мы получили способ вычисления средних значений различных величин через волновую функцию $\psi(x)$ или ее компоненты Фурье $\Phi(p)$. При этом оказалось, что удобно ввести определенные линейные операторы, которые обладают некоторыми формальными свойствами чисел, но не коммутируют. Эти операторы не имеют непосредственного физического смысла, а играют роль чисто математических символов, используемых при расчете средних значений физически наблюдаемых величин. Их употребление очень удобно и значительно упрощает задачу расчета средних значений. Поэтому операторы широко применяются в квантовой теории *).

Вывод уравнения Шрёдингера

22. Общая форма уравнения Шрёдингера. В части I уже показано, что для свободной частицы волновая функция удовлетворяет уравнению **)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (9.30)$$

Были приведены дополнительные доводы, показывающие, что это уравнение должно быть всегда первого порядка относительно времени для того, чтобы можно было получить картину движения волновых пакетов, правильно приближающуюся к классическому пределу, а также для того, чтобы могла существовать сохраняющаяся функция плотности вероятности с разумными общими свойствами. Это означает, что в общем случае (даже при действии сил) можно писать

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H(\psi), \quad (9.31)$$

где H — некоторая функция от ψ , не включающая производных ψ по времени. Это общее волновое уравнение.

В п. 1 было показано, что основной постулат квантовой теории заключается в гипотезе линейной суперпозиции волн. Это означает, что если ψ_1 и ψ_2 — возможные волновые функции, то $a\psi_1 + b\psi_2$ — тоже возможная волновая функция. Но так как все возможные волновые функции должны быть решениями волнового уравнения, то сумма двух решений тоже является решением. Поэтому волновое

*) Нельзя согласиться с утверждением автора, что операторы не имеют физического смысла. Они не могут быть непосредственно обнаружены в измерениях с макроприбором, но они представляют собой математическое выражение свойств реальных микрообъектов. — *Прим. ред.*

**) Все обсуждение будет дано для случая одного измерения, но его очень легко обобщить на случай трех измерений.

уравнение должно быть *линейным*, а H — линейным оператором разбившегося выше типа.

23. Сохранение вероятности и эрмитовость H . От оператора H дополнительно требуется, чтобы он был эрмитовским для сохранения вероятности постоянной, т. е. должно быть $\partial P / \partial t = 0$, где P — интегральная вероятность ($P = \int \psi^* \psi dx$). Это означает, что

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dx = 0.$$

Из волнового уравнения (9.31) можно выразить $\partial \psi / \partial t$ через ψ , учтя также, что

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H^* \psi^*.$$

Получаем

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \int (\psi H^* \psi^* - \psi^* H \psi) dx. \quad (9.32)$$

Используя определение эрмитовски сопряженного оператора (уравнение (9.25)), получаем

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \int \psi^* (H^+ - H) \psi dx. \quad (9.33)$$

Если выражение (9.33) равно нулю для произвольного ψ , то в соответствии с определением, даваемым уравнением (9.13), H является эрмитовским оператором. Обратно, если H — эрмитовский оператор, то вероятность всегда сохраняется.

24. Определение H из принципа соответствия. Дальнейшие ограничения на H накладывает принцип соответствия. Их можно вывести таким же путем, какой использовался при выводе волнового уравнения свободной частицы. В случае свободной частицы мы получили волновое уравнение из соотношений де Бройля: $E = \hbar \nu$ и $p = \hbar / \lambda$. Но последнее было получено из условия, что волновые пакеты движутся со скоростью классической частицы, а также из условия $E = p^2 / 2m$. Теперь потребуем, чтобы средняя скорость волнового пакета равнялась скорости классической частицы даже при действии сил. Это в сущности является требованием, чтобы наша теория удовлетворяла принципу соответствия или, иными словами, чтобы мы получали классический результат, когда точно не учитываются волновые свойства материи (т. е. интересуются только вопросом, как в среднем движется волновой пакет).

25. Общая формула для производных по времени от средних значений переменных. Для дальнейшего уточнения вида оператора H с помощью принципа соответствия нам понадобится формула,

определяющая временное изменение среднего значения любого оператора O . Итак, мы хотим вычислить

$$\frac{d}{dt} \bar{O} = \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} O \psi + \psi^* O \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dx + \int \psi^* \frac{\partial O}{\partial t} \psi dx. \quad (9.34)$$

Отметим, что производная $\partial O / \partial t$ характеризует только явную зависимость O от времени. Поэтому для операторов x и p $\partial O / \partial t = 0$, но для $O = x + pt$ имеем $\partial O / \partial t = p$. Отметим также, что $\partial O / \partial t$ — эрмитовский оператор, если оператор O также эрмитовский.

Выражая $\partial \psi / \partial t$ через ψ и $\partial \psi^* / \partial t$ через ψ^* , опять получаем

$$\frac{d}{dt} \bar{O} = \frac{i}{\hbar} \int [(H^* \psi^*)(O \psi) - (\psi^* O H \psi)] dx + \int \psi^* \frac{\partial O}{\partial t} \psi dx. \quad (9.35)$$

Исходя из нашего определения эрмитовски сопряженного оператора (см. (9.23)), имеем

$$\frac{d}{dt} \bar{O} = \frac{i}{\hbar} \int \psi^* (H^* O - O H) \psi dx + \int \psi^* \frac{\partial O}{\partial t} \psi dx. \quad (9.36)$$

Так как H должен быть эрмитовским оператором, то выражение (9.36) можно переписать

$$\frac{d}{dt} \bar{O} = \frac{i}{\hbar} \int \psi^* (H O - O H) \psi dx + \int \psi^* \frac{\partial O}{\partial t} \psi dx. \quad (9.37)$$

Это означает, что если известен коммутатор любого оператора O с оператором H , то всегда можно получить производную O по времени.

Заметим, что мы вычислили полную производную среднего значения O . Величина производной частично зависит от изменений ψ , а частично от изменений самого оператора O , вызванных его явной зависимостью от времени. Поэтому важно отметить, что $(d/dt) \bar{O}$ сильно отличается от $\partial O / \partial t$.

26. Задача вычисления среднего движения волнового пакета. По законам Ньютона движение описывается (классически) уравнениями

$$\frac{dp}{dt} = - \frac{\partial V}{\partial x} \quad \text{и} \quad \frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}. \quad (9.38)$$

В квантовой теории нельзя даже определить производных от x и p в классическом смысле, так как здесь отсутствует какая-либо непрерывная траектория частицы (см. гл. 8, п. 6). Ближайшей величиной к производным является скорость изменения средних значений x и p со временем. В классическом пределе, где шириной волнового пакета можно пренебречь, эти величины становятся равными значениям, рассчитанным классически. Это условие легче всего удовлетворить требованием, чтобы в квантовой теории ньютоновские законы

движения были справедливы при выражении их через средние величины $\bar{x}$ и $\bar{p}$. Поэтому имеем

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{dt} \bar{p} &= - \int \psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \psi dx, \\ \frac{d}{dt} \bar{x} &= \int \psi^* \frac{p}{m} \psi dx = \int \psi^* \frac{\hbar}{im} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx. \end{aligned} \right\} \quad (9.39)$$

Первое уравнение означает, что скорость изменения среднего импульса равна средней силе; второе — что скорость изменения средней координаты равна средней величине p/m .

Вычислим $d\bar{p}/dt$ из уравнения (9.36). Заметим, что $\partial p/\partial t = 0$.

Для нас удобнее записать $H = \frac{p^2}{2m} + g$, где g — оператор, равный нулю в отсутствие сил. (См. уравнение (3.29) — уравнение Шрёдингера для свободной частицы.) Мы получаем

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \left[\left(\frac{p^2}{2m} p - p \frac{p^2}{2m} \right) + (gp - pg) \right] \psi dx. \quad (9.40)$$

Так как p коммутирует с p^2 , то получаем (заменяя $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$)

$$\int \psi^* \left(g \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} g \psi \right) dx = - \int \psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \psi dx,$$

или

$$\int \psi^* \left(\frac{\partial g}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \right) \psi dx = 0. \quad (9.41)$$

Формула верна для произвольной функции ψ . Проще всего удовлетворить этому соотношению, если принять $g = V$. В более общем виде, можно положить $g = V + f$, где

$$\int \psi^* \frac{\partial f}{\partial x} \psi dx = 0$$

для произвольной функции ψ . Но это возможно при произвольном ψ только, если $\partial f/\partial x = 0$ и, следовательно, если $f = f(p)$ (см. теорему в п. 21). Итак, в общем случае, мы получаем

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + f(p). \quad (9.42)$$

Покажем далее, что $f(p) = 0$ при удовлетворении уравнения

$$\frac{d}{dt} \bar{x} = \int \psi^* \frac{p}{m} \psi dx. \quad (9.43)$$

Чтобы сделать это, запишем (замечая, что $xV - Vx = 0$)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \bar{x} &= \frac{i}{\hbar} \int \psi^* (Hx - xH) \psi dx = \\ &= \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x\psi) + x \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] dx + \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \int \psi^* [f(p)x - xf(p)] \psi dx. \end{aligned}$$

Но $\frac{\partial^2}{\partial x^2} (x\psi) = 2 \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$. Следовательно, мы получаем

$$\frac{d}{dt} \bar{x} = \frac{1}{m} \int \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \frac{i}{\hbar} \int \psi^* [f(p)x - xf(p)] \psi dx. \quad (9.44)$$

Для удовлетворения уравнения (9.44) необходимо, чтобы

$$\int \psi^* [f(p)x - xf(p)] \psi dx = 0$$

для произвольной функции ψ . Это возможно только при условии $f(p)x - xf(p) = 0$. Легко убедиться, что нет ни одной функции от p , удовлетворяющей этому условию, кроме постоянной. Например,

$$(p^n x - x p^n) \psi = \left(\frac{\hbar}{i} \right)^n \left[\frac{\partial^n}{\partial x^n} (x\psi) - x \frac{\partial^n \psi}{\partial x^n} \right] \neq 0.$$

Следовательно, $f(p)$ добавляет к H самое большее — постоянную величину, и ее при желании можно включить в $V(x)$. Итак, мы доказали, что ньютоновские уравнения движения удовлетворяются для средних значений, если ψ является решением следующего волнового уравнения:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi. \quad (9.45)$$

Эренфест впервые показал, что это волновое уравнение удовлетворяет ньютоновским уравнениям движения для средних значений, вот почему этот результат называют теоремой Эренфеста.

Если записать этот результат в операторной форме, то получим

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{p^2}{2m} + V \right) \psi = H\psi. \quad (9.46)$$

Таким образом, оператор H является классической функцией Гамильтона, в которой p заменено на $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$.

27. Общее правило для вычисления H . Можно показать, что полученный только что результат обобщается следующим образом: волновое уравнение для определенной функции ψ имеет вид $i\hbar (\partial \psi / \partial t) = H\psi$, где H можно получить из классической функции Гамильтона заме-

ной каждого импульса p , канонически сопряженного координате *) q , на оператор $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}$. Если p и q входят в виде сомножителей, то такие члены нужно предварительно симметризовать, чтобы сделать H эрмитовским оператором.

28. Является ли вышеприведенное уравнение наиболее общим из всех возможных? Можно ли считать, что в этом выводе получено наиболее общее волновое уравнение, согласующееся с принципом соответствия? Ответ оказывается отрицательным. Волновое уравнение было выведено так, как если бы квантовомеханические средние значения от изменений x и p со временем были бы связаны друг с другом так же, как и в классической механике. Но в любом классическом опыте энергия никогда не измеряется с точностью более высокой, чем порядок $\hbar\nu$. (Наблюдение спектральных линий — это чисто квантовомеханический опыт, потому что, согласно классической теории, спектры должны быть сплошными.) Если к H добавляются члены, которые увеличивают среднюю энергию на величину порядка $\hbar\nu$, то их действие невозможно наблюдать при чисто классическом эксперименте. Поэтому только с помощью одного принципа соответствия оператор Гамильтона определяется неоднозначно. Например, небольшие поправки вносятся спином и другими релятивистскими эффектами, которыми мы пренебрегали, но которые нужно учитывать при более строгом рассмотрении задачи (в связи с этим см. п. 2).

Поэтому приведенный выше вывод **) не является единственным выводом уравнения Шрёдингера, а лишь таким, который дает основные члены уравнения. Цель его — дать возможность понять происхождение этого уравнения из физических соображений, а не взять его «с потолка», чтобы затем путем рассуждений найти его физическое обоснование. Полезно знать также об отсутствии однозначности уравнения, так как это показывает, какие видоизменения в случае необходимости можно сделать, чтобы достигнуть согласия с неклассическими опытными результатами.

29. Значение волнового уравнения. Волновое уравнение показывает, как меняется со временем волновая функция. Мы видели, что таким образом определяется классическое движение. Не только классические, но и все другие средние значения меняются так, как

*) Строго говоря, это правило справедливо только для прямоугольных координат. Операторы можно выразить в непрямоугольных координатах путем соответствующих преобразований. См., например, гл. 14 и 15.

**) Вряд ли можно согласиться с автором, что это — вывод уравнения Шрёдингера, ибо мы можем вывести математически менее общие уравнения из более общих, а в нерелятивистской квантовой механике уравнение Шрёдингера есть наиболее общее. Его можно также установить как обобщение всей совокупности опытных фактов, составляющих содержание нерелятивистской квантовой механики. — *Прим. ред.*

предписывает волновое уравнение. Поэтому уравнение Шрёдингера аналогично уравнению движения Ньютона в классической физике, но, в отличие от уравнения Ньютона, оно определяет только вероятность реальных событий*).

30. Общее определение тока вероятности. Теперь мы можем показать, что если гамильтониан имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x),$$

то ток вероятности такой же, какой дается уравнением (4.4а). Чтобы увидеть это, напомним формулу (заметим, что V всегда вещественно)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x)}{\partial t} &= \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) = \\ &= -\frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right), \end{aligned} \quad (9.47)$$

где мы использовали уравнение Шрёдингера для исключения $\partial \psi / \partial t$ и $\partial \psi^* / \partial t$. Обозначив $S = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right)$, получаем

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} = 0 \quad (9.48)$$

в соответствии с уравнением (4.4а). Эти результаты легко обобщить на случай трех измерений, а именно:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi \quad \text{и} \quad S = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (9.49)$$

31. Истолкование величины $\bar{H}$ как средней энергии. Имеет ли H другой физический смысл, кроме того, что определяет способ изменения ψ со временем? Чтобы выяснить это, рассмотрим среднее значение

$$\bar{H} = \int \psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi dx = \frac{\bar{p}^2}{2m} + \overline{V(x)}. \quad (9.50)$$

Поскольку H — эрмитовский оператор, его среднее значение вещественно. Более того, ясно, что $\bar{H}$ равно $\frac{p^2}{2m} + V(x)$. В классическом пределе это как раз равно полной энергии системы. Так как квантовомеханические средние значения получаются по правилу замены p оператором $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, то, следовательно, $\bar{H}$ в общем случае представляет собой среднее значение энергии.

*) Поэтому для этих вероятностей и в квантовой механике имеет место обычный механический принцип причинности. — *Прим. ред.*

32. Закон сохранения энергии. В классической физике, когда гамильтониан не является явной функцией времени, можно доказать, что величина H является постоянной движения; это и означает, что энергия сохраняется. Для доказательства рассмотрим формулу

$$\frac{d}{dt}[H(p, q, t)] = \frac{\partial H}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial H}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial H}{\partial t}. \quad (9.51)$$

В соответствии с каноническими уравнениями имеем

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad \text{и} \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}.$$

В результате получаем

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}. \quad (9.52)$$

Если $\partial H / \partial t = 0$ (как это бывает обычно), то $dH / dt = 0$ и $H = \text{const}$. В квантовой теории производная среднего значения $\bar{H}$ определяется выражением (9.37)

$$\frac{d\bar{H}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int \psi^* (H\psi - \psi H) dx + \int \psi^* \frac{\partial H}{\partial t} \psi dx = \frac{\partial \bar{H}}{\partial t}. \quad (9.53)$$

Следовательно, $\bar{H}$ — постоянная движения и в этом случае, если только H не является явной функцией от t .

Мы показали, таким образом, что аналогично классической механике, где канонические уравнения движения гарантируют сохранение энергии во всех случаях, когда H не зависит от времени, в квантовой теории уравнение Шрёдингера гарантирует сохранение средней энергии.

ФЛУКТУАЦИИ, КОРРЕЛЯЦИИ И СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ

1. Статистические флуктуации и корреляции. Мы уже видели, что в процессе измерения наблюдаемое значение переменной будет в общем случае меняться от одного измерения к другому. Полезно знать критерий этой флуктуации. В классической физике такие флуктуации часто измеряются по величине средних квадратов отклонений действительных значений от средней величины. Так, средняя флуктуация x равна

$$\bar{F} = \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{[x^2 - 2x\bar{x} + (\bar{x})^2]} = \bar{x}^2 - 2\bar{x}\bar{x} + (\bar{x})^2 = \bar{x}^2 - (\bar{x})^2. \quad (10.1)$$

Ясно, что если нет флуктуаций, т. е. $x = \bar{x}$ во всех измерениях, то $\bar{F} = 0$. Так как $(x - \bar{x})^2$ всегда величина положительная, то также ясно, что во всех измерениях, где x отличается от $\bar{x}$, $\bar{F}$ не равно нулю. Чем больше разность между x и $\bar{x}$, тем больше $\bar{F}$.

Конечно, надо помнить, что знание $\bar{F}$ и $\bar{x}$ никоим образом не определяет плотность вероятности $P(x)$, а просто дает в общем случае распределение величины x около своего среднего значения. Действительно, можно сказать, что величина $(x - \bar{x})^2$ является критерием неопределенности x , так как она примерно показывает, насколько будут меняться значения x от одного измерения к другому. Поэтому можно записать $(x - \bar{x})^2 = (\Delta x)^2$, где Δx — неопределенность x .

2. Обобщение на случай квантовой теории. Эти представления легко обобщить в случае квантовой теории. Если известна волновая функция $\psi(x)$, то известна и плотность вероятности

$$P(x) = \psi^*(x)\psi(x),$$

и поэтому мы знаем среднее значение любой функции x . В частности, среднее значение F дается выражением

$$\bar{F} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)(x - \bar{x})^2 \psi(x) dx = (\Delta x)^2. \quad (10.2)$$

Однако очень часто неудобно иметь дело с детальным видом волновой функции, так как это требует решения волнового уравнения. Иногда достаточно знать лишь общий характер распределения, а именно значения $\bar{x}$ и $\bar{F}$, которые в общих чертах характеризуют основные общие свойства распределения. В частности, позже мы увидим, что возможно сделать определенные выводы о величине $(x - \bar{x})^2$, даже когда неизвестен точный вид функции ψ . Введение средних величин типа $\bar{F}$ тогда оказывается весьма полезным.

Подобным же путем можно ввести среднюю флуктуацию p :

$$\overline{(p - \bar{p})^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \bar{p} \right)^2 \psi dx = (\Delta p)^2, \quad (10.3)$$

где Δp — неопределенность p .

Если известна функция ψ , то значения $(\Delta x)^2$ и $(\Delta p)^2$ вычисляются из предыдущих формул. Позже будет исследован общий вид произведений типа $\Delta x \Delta p$ и показано, что соотношение неопределенностей всегда удовлетворяется для любой волновой функции. Пока же можно рассматривать лишь некоторые частные виды волновых функций, вроде приведенных в задаче 1, и показать выполнение соотношения неопределенностей в этих случаях.

Задача 1. Показать, что соотношение неопределенностей $(\Delta p \Delta x \geq \hbar/2)$ выполняется для следующих трех волновых пакетов *):

$$\begin{aligned} \psi &= a_1 e^{-\alpha x^2/2}, \\ \psi &= a_2 e^{-\alpha |x|}, \\ \psi &= \frac{a_3}{(\alpha^2 + x^2)^2}. \end{aligned}$$

В каждом случае α выбирается из соображений нормировки полной интегральной вероятности.

3. Корреляция между p и x . При любом статистическом распределении двух классических переменных, таких, как p и x , важно знать, коррелируют ли эти две переменные или нет. Например, среди людей нет однозначной связи между их ростом и весом но эти две величины статистически связаны (коррелируют) друг с другом в том смысле, что обычно более высокий человек тяжелее, чем более низкий. Аналогично можно спросить, имеет ли распределение p какую-либо связь (корреляцию) с распределением x ? Другими словами, соответствует ли обычно большему p большее x или, наоборот, большее p встречается при меньших x ? Если одна из этих

*) Точная величина неопределенности зависит от того, как определяются Δp и Δx . Для используемого здесь определения правильна величина $\hbar/2$.

статистических связей существует, то можно сказать, что p и x коррелируют. С другой стороны, если такой связи нет, то об этих двух величинах говорят, что они статистически независимы.

Предположим, что рост людей h и их вес w — статистически независимы. Это означает, что распределение роста не зависит от веса. Тогда можно записать, что вероятность иметь данный рост между h и $h + dh$ равна $R(h)dh$. Аналогично, вероятность иметь любой вес между w и $w + dw$ не зависит от h и поэтому равна $S(w)dw$. По определению вероятность совместного появления двух независимых результатов равна произведению их вероятностей. Поэтому вероятность того, что рост человека лежит между h и $h + dh$, а вес между w и $w + dw$, равна произведению

$$P(h, w) dh dw = R(h) S(w) dh dw.$$

Если распределение нельзя записать как произведение, то две переменные не являются статистически независимыми. Рассмотрим, например, такую формулу $P(h, w) = 1/(h^2 + w^2)$. Ясно, что функцию распределения относительно h нельзя рассматривать как независимую от w .

4. Количественная мера корреляции в классической теории. Удобной количественной мерой степени корреляции двух классических величин является следующее среднее значение:

$$C_{11} = \overline{(x - \bar{x})(p - \bar{p})} = \overline{xp} - \bar{x}\bar{p}. \quad (10.4)$$

Если распределение x статистически независимо от распределения p , то должно быть $C_{11} = 0$, так как в этом случае

$$\overline{xp} = \int R(x) S(p) xp dx dp = \bar{x}\bar{p}.$$

Однако возможно, что $C_{11} = 0$ даже при наличии корреляции. Например, большие значения $|x|$ могут коррелировать с большими значениями $|p|$, но таким образом, что для каждой величины x величина p с равной вероятностью может быть и положительной, и отрицательной. Следовательно, и $\overline{xp}$ и $\bar{x}\bar{p}$ исчезают, даже если существует некоторая корреляция.

Меру корреляций для этого более сложного случая можно получить, рассмотрев функцию

$$C_{22} = \overline{x^2 p^2} - (\bar{x})^2 (\bar{p})^2. \quad (10.5)$$

Ясно, что величина C_{22} равна нулю, если x и p статистически независимы, но не равна нулю в вышеприведенном случае, когда $C_{11} = 0$.

Однако в общем случае могут существовать еще более сложные случаи корреляции, в которых исчезают и C_{11} и C_{22} . Для того чтобы

охватить все возможные случаи корреляции, нужно изучить функции вида

$$C_{nm} = \overline{x^n p^m} - (\bar{x})^n (\bar{p})^m. \quad (10.6)$$

5. Классификация классических статистических систем по средним значениям произведения $x^n p^m$. Вышеприведенное рассмотрение показывает значимость средних величин всех членов вида $x^n p^m$. Члены типа $\overline{x^n}$ и $\overline{p^m}$ можно рассматривать аналогично членам $\overline{x}$, $\overline{x^2}$, $\overline{p}$ и $\overline{p^2}$, но в применении к измерениям более сложных и тонких свойств флуктуаций. Следовательно, имея полные сведения о флуктуациях и корреляциях, можно рассчитать все значения $\overline{x^n p^m}$. Из произведений $x^n p^m$ можно составить произвольную функцию $f(x, p)$. Ее среднее значение равно

$$\bar{f}(x, p) = \sum \overline{A_{nm} x^n p^m} = \sum A_{nm} \overline{x^n p^m}.$$

Это означает, что флуктуации и корреляции определяют среднее значение любой физически наблюдаемой величины, так что они описывают все черты распределения, которые нас интересуют. В статистике $x^n p^m$ называется n, m -м моментом распределения по аналогии с моментами импульса в механике.

Если флуктуаций нет, мы должны иметь $\bar{f}(x, p) = f(\bar{x}, \bar{p})$. Эти две величины различаются только из-за флуктуаций. Каждый вид функции обладает чувствительностью к определенным типам флуктуаций и корреляций, зависящим от величины коэффициента каждого члена $x^n p^m$ в степенном ряду разложения этой функции.

6. Квантовое определение корреляций. В квантовой теории корреляционные функции получаются простой заменой p на оператор $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, а произведение $x p$ — средним от двух произведений с переставленными сомножителями $\frac{1}{2}(x p + p x)$. Таким образом,

$$C_{nm} = \frac{1}{2} \int \psi^* \left[x^n \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^m + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^m x^n \right] \psi dx - \left(\int \psi^* x^n \psi dx \right) \left[\int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^m \psi dx \right]. \quad (10.7)$$

Задача 2. Найти C_{11} и C_{22} для функции $\psi = a e^{-\alpha x^2/2}$, где α — нормирующий множитель.

Задача 3. Доказать, что $C_{11} = 0$ для любой вещественной волновой функции.

7. Применение к задаче о расплывании волнового пакета для свободной частицы. Вычислим C_{11} для расплывающегося с течением времени волнового пакета, определенного уравнениями (3.14) и (3.22). (Допускаем как частный случай, что $\bar{p} = \bar{x} = 0$.) Так как

первоначально волновая функция была вещественная, то C_{11} исчезает при $t=0$; следовательно, в это время нет простых корреляций между импульсом и координатой. Рассмотрим теперь, что происходит при $t > 0$. Для этого запишем волновую функцию в виде

$$\psi = \alpha \exp \left[- (A - iB) \frac{x^2}{2} \right], \quad (10.8)$$

где α — нормирующий множитель, определяемый из соотношения

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 1 = \alpha^* \alpha \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Ax^2} dx,$$

а

$$A = \frac{(\Delta k)^2}{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2} (\Delta k)^4} \quad \text{и} \quad B = (\Delta k)^4 \frac{\hbar t}{m} \frac{1}{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2} (\Delta k)^4}. \quad (10.9)$$

Далее, $\bar{x} = 0$, так как

$$(\alpha^* \alpha) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Ax^2/2} x e^{-Ax^2/2} dx = 0.$$

Итак, мы получаем

$$C_{11} = \frac{\hbar}{2i} \alpha^* \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[- (A + iB) \frac{x^2}{2} \right] \left(x \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} x \right) \times \\ \times \exp \left[- (A - iB) \frac{x^2}{2} \right] dx. \quad (10.10)$$

Интегрируя по частям член

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[- (A + iB) \frac{x^2}{2} \right] \frac{\partial}{\partial x} x \exp \left[- (A - iB) \frac{x^2}{2} \right] dx,$$

замечаем, что равна нулю внеинтегральная часть. Используя соотношение

$$\frac{\partial}{\partial x} \exp \left[- (A + iB) \frac{x^2}{2} \right] = -x (A + iB) \exp \left[- (A + iB) \frac{x^2}{2} \right],$$

получаем

$$C_{11} = \frac{\hbar}{2i} \alpha^* \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[- (A + iB) \frac{x^2}{2} \right] x^2 (A + iB - A + iB) \times \\ \times \exp \left[- (A - iB) \frac{x^2}{2} \right] dx, \quad (10.11)$$

или

$$C_{11} = \hbar \alpha^* \alpha B \int_{-\infty}^{\infty} e^{-A x^2} x^2 dx = \frac{\hbar B}{2A} = \frac{\hbar (\Delta k)^2}{2m} t = \frac{(\Delta p)^2}{2m} t, \quad (10.12)$$

где $(\Delta p)^2$ — начальная неопределенность импульса.

Ясно, что хотя корреляции при $t = 0$ отсутствуют, они возникают с течением времени. Физический смысл этого явления заключается просто в том, что более быстрые частицы продвигаются дальше, так что больший импульс стремится коррелировать с прохождением большего расстояния.

Другой способ выяснения источника корреляций заключается в учете того факта, что оператор импульса, действуя на волновую функцию $\exp[-(A - iB)x^2/2]$, дает

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \exp\left[-(A - iB)\frac{x^2}{2}\right] = \hbar x (B + iA) \exp\left[-(A - iB)\frac{x^2}{2}\right].$$

Множитель $\exp(iBx^2/2)$, который грубо выражает импульс порядка Bx , показывает, что электрон обычно имеет большой импульс при большом x .

Полученные выше результаты ясно показывают, что волновая функция — далеко не только волна вероятности. Плотность вероятности $P(x)$ просто равна

$$P(x) = \psi^*(x) \psi(x) = \alpha^* \alpha e^{-Ax^2/2}.$$

Хотя члены с B не входят в выражение для $P(x)$, они оказывают влияние на корреляцию между импульсом и координатой. Таким образом, фаза волновой функции (в данном случае $\exp(iBx^2/2)$) дает очень много различных сведений, многие из которых выражают довольно тонкие соотношения между значениями различных величин (см. гл. 6, пп. 6 и 8).

8. Полуклассическое описание частицы с неопределенными координатой и импульсом. В гл. 5, п. 4 было показано, что в первом приближении квантовые свойства материи можно описать через классическую частицу с неопределенными импульсом и координатой, если только принять, что

$$\Delta p \Delta q \gg (\sim \hbar).$$

Однако в гл. 6, п. 11 мы видели, что этим представлением надо пользоваться осторожно, так как оно не дает вполне точного представления о волновых свойствах материи. Все же в определенных пределах оно часто бывает очень полезно. Например, результаты предыдущего пункта молчаливо интерпретировались с помощью представления о том, что электрон до некоторой степени действует как классическая частица с вероятностным распределением импульсов и

координат. Тогда распыление волнового пакета связано с тем, что частицы, имеющие разную скорость, проходят в одно и то же время разные расстояния. Этот процесс вводит корреляцию между p и x , поскольку наиболее быстрые частицы проходят наибольшие расстояния.

Представляет интерес выразить распыление распределения вероятности в виде диаграммы в фазовом пространстве. Первоначальное распределение вероятности пропорционально $\exp[-x^2/(\Delta x)^2]$ в координатном пространстве. Как было показано при помощи разложения в ряд Фурье (см. гл. 3, п. 2), это распределение пропорционально $\exp[-p^2/(\Delta p)^2]$ в пространстве импульсов. Классическую частицу с таким распределением вероятности скорее всего можно обнаружить в эллипсе фазового пространства с центром в начале координат и с полуосями Δp и Δx , как показано на рис. 25. Площадь этого

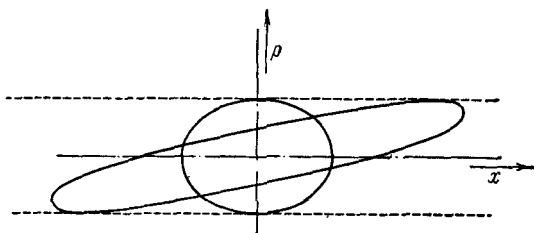


Рис. 25.

эллипса приблизительно равна $\pi \Delta p \Delta x_0 \sim h/2$. С течением времени частицы с положительным импульсом движутся вправо, а частицы с отрицательным импульсом — влево. Следовательно, эллипс скашивается, как показано на рис. 25. Центр эллипса не изменяет своего положения, Δp также не меняется, поскольку каждая частица движется с постоянной скоростью, но Δx возрастает.

Задача 4. Доказать, что площадь эллипса остается постоянной (это частный случай теоремы Лиувилля).

Задача 5. Доказать, что корреляционная функция C_{11} , полученная путем применения гауссовского классического распределения импульсов и координат частицы, не отличается от той же функции, полученной с помощью квантовой теории. Показать, что C_{22} , напротив, не одинакова в этих двух случаях, а различается на величины порядка $\hbar$. (Это частный случай общего вывода о том, что волновые свойства материи нельзя полностью выразить с помощью классического представления о частице с неопределенным импульсом и координатой.)

Задача 6. Подробно исследовать способ, с помощью которого можно отдать предпочтение одной из корреляционных функций в этом случае так, чтобы произведение $\Delta x \Delta p$ вычислялось с минимальной неопределенностью порядка $\hbar$ независимо от ширины волнового пакета.

9. Общий вывод соотношений неопределенностей. Мы уже выяснили, что величины x и p нельзя измерить одновременно и что

минимальные неопределенности этих величин отвечают соотношению $(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 \cong \hbar^2$. Покажем теперь, что минимальные неопределенности для двух эрмитовских операторов A и B удовлетворяют правилу

$$\overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} \cong \left[\frac{i}{2} (AB - BA) \right]^2. \quad (10.13)$$

(Так как $i(AB - BA)$ — эрмитовский оператор, то величина в правой части всегда положительна.) Ясно, что, положив

$$A = p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{и} \quad B = x,$$

мы получим обычное соотношение неопределенностей, так как

$$i(pq - qp) = \hbar.$$

Неопределенность $\overline{(\Delta A)^2}$ равна $\int \psi^* (A - \bar{A})^2 \psi dx$. Для простоты положим $A - \bar{A} = \alpha$ и $B - \bar{B} = \beta$. Итак, нам нужно вычислить величину

$$I = \left(\int \psi^* \alpha^2 \psi dx \right) \left(\int \psi^* \beta^2 \psi dx \right). \quad (10.14)$$

Поскольку α — эрмитовский оператор, то можно записать

$$\int \psi^* \alpha^2 \psi dx = \int \psi^* \alpha (\alpha \psi) dx = \int (\alpha^* \psi^*) (\alpha \psi) dx = \int |\alpha \psi|^2 dx. \quad (10.15)$$

То же можно сделать и с β . Окончательно имеем

$$I = \left(\int |\alpha \psi|^2 dx \right) \left(\int |\beta \psi|^2 dx \right). \quad (10.16)$$

Здесь удобно представить интегралы как пределы сумм, тогда будем иметь

$$I = \left[\sum_i |\alpha \psi_i|^2 \Delta x_i \right] \left[\sum_j |\beta \psi_j|^2 \Delta x_j \right] = \sum_{ij} |\alpha \psi_i|^2 |\beta \psi_j|^2 \Delta x_i \Delta x_j. \quad (10.17)$$

Используем теперь теорему, называемую *неравенством Шварца*. Она выражается следующим неравенством:

$$\sum_{ij} |A_i|^2 |B_j|^2 \geq \left| \sum_i A_i^* B_i \right|^2. \quad (10.18)$$

Чтобы доказать это, запишем

$$\left| \sum_i A_i^* B_i \right|^2 = \sum_{ij} A_i^* B_i A_j B_j^*,$$

а затем рассмотрим следующую величину:

$$Q = \sum_{ij} |A_i|^2 |B_j|^2 - \left| \sum_i A_i^* B_i \right|^2 = \sum_{ij} (|A_i|^2 |B_j|^2 - A_i^* B_i A_j B_j^*). \quad (10.19)$$

Заметим, что если $i = j$, то соответствующие члены в сумме Q исчезают. Но если i и j — фиксированные величины, не равные друг другу, то соответствующие члены равны

$$|A_i|^2 |B_j|^2 + |A_j|^2 |B_i|^2 - A_i^* B_j^* A_j B_i - A_j^* B_i^* A_i B_j = |A_i B_j - A_j B_i|^2. \quad (10.20)$$

Однако эта величина всегда положительна или равна нулю. Следовательно, Q состоит из членов, которые не могут быть отрицательными, и поэтому $Q \geq 0$. Это доказывает неравенство Шварца. Ясно, что $Q = 0$, только если каждый член ряда равен нулю или если $A_i B_j - A_j B_i = 0$. Это означает, что $A_i/A_j = B_i/B_j$ или $A_i = C B_i$, где C — константа.

Применение неравенства Шварца к уравнению (10.17) дает теперь

$$I \geq \left| \sum_i (\alpha^* \psi_i^*)(\beta \psi_i) \Delta x_i \right|^2 = \left| \int \alpha^* \psi^* \beta \psi dx \right|^2. \quad (10.21)$$

Поскольку α — эрмитовский оператор, получаем

$$I \geq \left| \int \psi^* \alpha \beta \psi dx \right|^2 = \left| \int \psi^* \left(\frac{\alpha\beta + \beta\alpha}{2} \right) \psi dx + \int \psi^* \left(\frac{\alpha\beta - \beta\alpha}{2} \right) \psi dx \right|^2. \quad (10.22)$$

Оператор $(\alpha\beta + \beta\alpha)$ является эрмитовским, следовательно, его среднее значение всегда вещественно и может быть обозначено числом P . Мы знаем также, что $i(\alpha\beta - \beta\alpha)$ тоже является эрмитовским оператором, следовательно, и его среднее значение равно некоторому вещественному числу Q .

Итак, мы имеем

$$I \geq |P - iQ|^2 = P^2 + Q^2.$$

Заметим теперь, что

$$\frac{\alpha\beta + \beta\alpha}{2} = \frac{1}{2} [(A - \bar{A})(B - \bar{B}) + (B - \bar{B})(A - \bar{A})]; \quad (10.23)$$

это как раз и является корреляционной функцией C_{11} для переменных A и B . Самое большое, чего мы можем достичь, это сделать корреляционную функцию равной нулю. Однако независимо от того, равно ли C_{11} нулю или нет, справедливо следующее соотношение:

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 = I \geq \left| \int \psi^* \left(\frac{\alpha\beta - \beta\alpha}{2} \right) \psi dx \right|^2 = \left| \frac{AB - BA}{2} \right|^2. \quad (10.24)$$

Это очень важный результат. Он означает, что когда A и B не коммутируют, их нельзя измерить одновременно с абсолютной точностью,

Можно доказать, что если A и B коммутируют, то их можно измерить одновременно, но доказательство мы здесь опускаем.

Когда минимально выражение $(\Delta A)^2(\Delta B)^2$? Для того чтобы в неравенстве (10.24) был знак равенства, должны выполняться два условия:

1) $\alpha\psi = C\beta\psi$ (это означает, что в неравенство Шварца входит знак равенства).

2) $\frac{\alpha\beta + \beta\alpha}{2} = 0$ (это означает, что α и β не коррелируют).

Рассмотрим частный случай

$$\alpha = (x - \bar{x}), \quad \beta = (p - \bar{p}).$$

Ограничимся случаем $\bar{x} = \bar{p} = 0$, обобщить результат на произвольные значения этих величин весьма просто. Мы получаем

$$p\psi = Cx\psi \quad \text{или} \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = Cx\psi. \quad (10.25)$$

Интегрирование дает $\psi = \exp(iCx^2/2)$. Ранее для волновых функций типа $\exp[-(A + iB)x^2/2]$ было показано, что C_{11} исчезает только, если $B = 0$. Следовательно, чтобы удовлетворить условию (2), надо сделать C мнимой величиной. Но мы должны также обеспечить существование выражения $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx$, т. е. полная вероятность

должна быть нормирована к единице. Это можно удовлетворить только, когда $C = ia$, где a — положительное число. Тогда мы получим $\psi = \exp(-ax^2/2)$, т. е. хорошо известное распределение Гаусса. В более общем случае, когда $\bar{x}$ и $\bar{p}$ не равны нулю, мы получим

$$\psi = \exp(i\bar{p}x) \exp\left[-a \frac{(x - \bar{x})^2}{2}\right]. \quad (10.26)$$

Этот результат является наиболее общей функцией, для которой справедлив знак равенства в соотношении неопределенностей.

Задача 7. Доказать полученный выше результат для волновой функции ψ наиболее общего вида.

Задача 8. Рассчитать $(\Delta x)^2$ и $(\Delta p)^2$ для волновой функции (10.8), которая первоначально при $t = 0$ имела вид функции Гаусса. Показать, что $(\Delta p)^2$ остается постоянным, но $(\Delta x)^2$ растет со временем. Следовательно, $(\Delta x)^2(\Delta p)^2 > \hbar^2/4$ при $t > 0$, даже если знак равенства справедлив при $t = 0$. Однако плотность вероятности $P = \alpha^* \alpha e^{-Ax^2}$ является гауссовской. Объяснить, почему знак равенства несправедлив, хотя P — гауссовская функция. (Это — другой пример физического значения фазовых соотношений волновой функции.)

10. Особые свойства гауссовской волновой функции. Мы уже видели, что гауссовская волновая функция обладает особым свойством, а именно, она имеет один и тот же вид в пространстве импульсов и в координатном пространстве. Можно показать, что наиболее общая волновая функция, имеющая это свойство, имеет вид $\exp[-ax^2 + ikx + ibx^2]$. Далее, как было показано в п. 9, при $b=0$ такая функция обуславливает минимальное значение величины $\Delta x \Delta p$; таким свойством обладает только эта функция. Эти особые свойства гауссовской функции делают ее полезной при рассмотрении многих вопросов. Кроме того, гауссовская функция непосредственно связана с волновыми функциями гармонического осциллятора (см. гл. 13). Поэтому гауссовские волновые функции играют большую роль в квантовой теории.

11. Задача многих частиц. С помощью изложенных выше представлений о статистической корреляции можно показать, как применить волновое уравнение к системе, состоящей более чем из одной частицы. Как уже указывалось в п. 1, в присутствии многих частиц волновая функция является функцией координат всех частиц. Чтобы показать, как можно определить вероятность для такой системы, рассмотрим сначала частный случай двух независимых частиц. Пусть волновая функция первой из них будет $\psi_A(x_1)$, а второй — $\psi_B(x_2)$. Вероятность того, что первая частица находится между x_1 и $x_1 + dx_1$, равна

$$P_A(x_1)dx_1 = |\psi_A(x_1)|^2 dx_1,$$

в то время как вероятность того, что вторая частица находится между x_2 и $x_2 + dx_2$, равна

$$P_B(x_2)dx_2 = |\psi_B(x_2)|^2 dx_2.$$

Поскольку эти вероятности независимы, вероятность того, что первая частица находится между x_1 и $x_1 + dx_1$, а вторая частица — между x_2 и $x_2 + dx_2$, равна, как показано в п. 3, произведению отдельных вероятностей, т. е.

$$P(x_1, x_2)dx_1 dx_2 = \psi_A^*(x_1)\psi_A(x_1)\psi_B^*(x_2)\psi_B(x_2)dx_1 dx_2.$$

Этот результат подсказывает естественное обобщение математического аппарата теории на случай двух частиц. Итак, мы пришли к определению волновой функции, зависящей от координат обеих частиц,

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_A(x_1)\psi_B(x_2);$$

вероятность же равна

$$P(x_1, x_2)dx_1 dx_2 = \psi^*\psi dx_1 dx_2.$$

Поэтому, когда две частицы независимы, волновые функции сами по себе, так же как и их вероятности, выражаются как произведение функций каждой переменной в отдельности.

Задача 9. Доказать, что если $\psi_A(x_1)$ и $\psi_B(x_2)$ по отдельности нормированы, то их произведение также нормировано (при интегрировании по x_1 и x_2).

Однако если между двумя частицами действуют силы, то распределение вероятностей перестает быть независимым. Так, например, если одна из частиц — электрон, а другая — протон, то они будут притягиваться и стремятся образовать атом водорода. В этом случае наиболее вероятно, что частицы будут находиться гораздо ближе друг к другу, чем они должны были бы быть в среднем при случайном распределении. Чтобы учесть эту возможность, запишем общую плотность вероятности в виде $P(x_1, x_2)$. При этих условиях волновая функция уже не должна выражаться произведением, так что ее следует записать в виде $\psi(x_1, x_2)$. Однако формула для вероятности остается

$$P(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \psi^*(x_1, x_2) \psi(x_1, x_2) dx_1 dx_2.$$

Легко показать, что с такими определениями P и ψ математический аппарат операторов и средних значений остается точно таким же, как и в случае одной частицы.

В качестве примера получим волновое уравнение для двух взаимодействующих частиц. Волновая функция имеет вид $\psi(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2)$, где x_1 — это координата x первой частицы, x_2 — второй частицы и т. д. В соответствии с обобщением на случай двух частиц (см. правило, данное в гл. 9, п. 27) оператор Гамильтона имеет вид

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2),$$

где $V(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2)$ — полная потенциальная энергия обеих частиц. Она включает энергию взаимодействия между двумя частицами наряду с другими источниками потенциальной энергии. Например, если каждая частица имеет заряд e , то

$$V = \frac{e^2}{r_{12}},$$

где

$$r_{12} = [(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2]^{1/2}.$$

Уравнение Шрёдингера принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} \nabla_1^2 + \frac{1}{m_2} \nabla_2^2 \right) + V(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2) \right] \psi.$$

Поскольку H — линейный оператор, уравнение также линейное. Это — уравнение волны в шестимерном пространстве, и в общем случае его очень трудно решить. Совершенно ясно, как обобщить уравнение на произвольное число частиц. Хотя эти уравнения зачастую очень трудно решить, но существуют различные приближенные методы, и был получен ряд решений различных задач для многих частиц, которые удовлетворительно согласуются с опытом. Итак, в принципе мы получили метод изучения произвольной системы. Это означает, что во всех случаях волновое уравнение играет такую же основную роль в квантовой теории, как ньютоновские законы движения в классической теории *).

12. Собственные значения и собственные функции операторов. Мы видели, что в общем случае, когда система находится в данном квантовом состоянии, т. е. когда задана волновая функция, наблюдаемую величину любой переменной нельзя предсказать точно — она флуктуирует около некоторого среднего значения от одного измерения к другому. Можно ли привести систему в такое квантовое состояние, в котором некая переменная имеет определенное, предсказываемое и воспроизводимое значение без флуктуаций? Да, это возможно.

Для того чтобы переменная O имела одну и ту же величину при всех наблюдениях, необходимо, во-первых, чтобы ее средняя флуктуация равнялась нулю, т. е.

$$\overline{O^2} - (\overline{O})^2 = \int \psi^* [O^2 - (\overline{O})^2] \psi dx = 0. \quad (10.27)$$

Во-вторых, необходимо, чтобы среднее значение любой функции O равнялось этой же функции от среднего значения, т. е.

$$\overline{f(O)} = f(\overline{O}). \quad (10.28)$$

Если это условие не соблюдается, то можно сделать вывод, что есть моменты, когда O отклоняется от средней величины.

Ясно, что одним из способов удовлетворения этому условию является такой выбор функции ψ :

$$O\psi_C = C\psi_C, \quad (10.29)$$

где C — константа. Если это соотношение удовлетворяется, то C называется *собственным значением* или *характеристическим значением*, оператора O , а ψ_C называется *собственной функцией*, или *характеристической функцией*, принадлежащей собственному значению C .

) Следует указать, что изложенное в п. 11 обобщение волнового уравнения на случай многих частиц предполагает существенно нерелятивистскую трактовку. (Более подробно по этому поводу см. [78], § 100 или [9], ч. 1, § 5.) — *Прим. ред.*

Если уравнение (10.29) удовлетворяется, то, так как ψ нормирована, мы имеем

$$\bar{O} = \int \psi_c^* O \psi_c dx = C \int \psi_c^* \psi_c dx = C.$$

Аналогично имеем

$$\bar{O}^n = \int \psi_c^* O^n \psi_c dx = C^n \int \psi_c^* \psi_c dx = C^n.$$

Следовательно, для произвольной функции, выраженной в виде степенного ряда, мы получаем

$$\bar{f}(O) = \sum_n A_n \bar{O}^n = \sum_n A_n C^n = f(C). \quad (10.30)$$

Итак, если ψ_c — собственная функция оператора O , то среднее значение произвольной функции O равно этой функции от среднего значения. Следовательно, отсутствуют флуктуации в величине O . Однако это не означает, что нет флуктуаций в величинах других операторов. Напротив, когда наблюдаемая величина, например импульс p , имеет заданное определенное значение, то мы уже знаем из соотношения неопределенностей, что сопряженная переменная x должна быть полностью неопределенной.

Можно показать, что если ψ не является собственной функцией оператора O , то величина O должна обладать некоторой флуктуацией.

Задача 9а. Доказать вышеприведенное положение.

13. Примеры собственных функций и собственных значений в координатном пространстве.

1) *Оператор импульса.* Собственные функции оператора импульса находятся из решения уравнения

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = p \psi, \quad (10.31a)$$

где p — постоянная. Мы получаем

$$\psi = e^{ipx/\hbar} \quad (10.31b)$$

— хорошо известную плоскую волну, которая представляет состояния с определенным импульсом p (p — собственное значение, $e^{ipx/\hbar}$ — собственная функция).

Строго говоря, вышеприведенную собственную функцию в общем случае нельзя нормировать к единице, потому что интегральная вероятность $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx$ расходится. Вспомним, однако, гл. 3, п. 2, что

в любой реальной задаче волновая функция должна принимать форму пакета, поскольку, как известно, частица существует где-то внутри определенной области пространства, а именно в пространстве, занятом аппаратурой. Чтобы получить ограниченный и поэтому нормированный пакет, можно произвести интегрирование по импульсам с соответствующим весовым фактором, как в уравнении (3.3). Однако практически такой пакет может стать настолько большим по сравнению с любыми физически допустимыми размерами, что мы обычно можем пренебречь его ограниченным характером, пользуясь почти любой величиной в качестве нормировочного коэффициента. Точно так же, неопределенность импульса в пакете Δp может быть сделана столь малой, что ею можно пренебречь в удовлетворительном приближении. Поэтому мы часто будем рассматривать волновые функции в виде $\exp(ipx/\hbar)$, понимая, что фактически они относятся к пакетам очень широким в координатном пространстве и соответственно узким в пространстве импульсов.

2) *Оператор энергии.* Для свободной частицы энергия $E = p^2/2m$. Поэтому уравнение для собственной функции имеет вид

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (10.32a)$$

Его решение равно

$$\psi = A \exp\left(i \frac{\sqrt{2mE}x}{\hbar}\right) + B \exp\left(-i \frac{\sqrt{2mE}x}{\hbar}\right), \quad (10.32b)$$

где A и B — произвольные постоянные.

Другими словами, каждому собственному значению E принадлежат две линейно независимые собственные функции, которые можно сложить в произвольной линейной комбинации. Используя равенство $p = \sqrt{2mE}$, мы видим, что эти две собственные функции имеют вид $\exp(ipx/\hbar)$ и $\exp(-ipx/\hbar)$ в соответствии с двумя возможными направлениями импульса, которые может иметь частица с заданной энергией. Этот результат имеет место для случая одного измерения. Для случая трех измерений имеется бесконечное число направлений, соответствующих заданной энергии, и поэтому бесконечное число собственных функций, принадлежащих одному собственному значению E .

14. Вырожденные операторы. Если более чем одна независимая собственная функция принадлежит данному собственному значению, то оператор называется *вырожденным* для этого собственного значения. Например, собственные значения оператора E имеют двукратное вырождение в одномерной задаче и бесконечную кратность вырождения в трехмерном пространстве.

Если только одна линейно независимая собственная функция принадлежит каждому собственному значению оператора, то последний

называется *невыврожденным*. Например, p — невырожденный оператор.

3) *Собственная функция оператора x* . Мы видели, что операторы p и E имеют довольно простые собственные функции в координатном пространстве. Что можно сказать об операторе x ? Ясно, что если взять любую непрерывную функцию от x , то оператор x умножает ее на переменное число, и потому по определению никакая непрерывная функция от x не может быть собственной функцией оператора x . Нам нужна такая функция, которая умножается на то же самое число независимо от величины x , т. е.

$$x\psi = C\psi, \quad (10.33) \quad \psi(x)$$

где C — постоянная. Единственная функция, удовлетворяющая этому условию, должна равняться нулю повсюду, кроме точки $x = C$. Эта функция весьма необычна, ее лучше рассматривать как предел обычной. В качестве примера можно взять функцию, изображенную на рис. 26. Функция равна нулю везде, кроме области Δx , где она равна H . Чтобы нормировать ее к единице, полагаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = \int_{C-\Delta x/2}^{C+\Delta x/2} H^2 dx = H^2 \Delta x = 1$$

или

$$H = \frac{1}{\sqrt{\Delta x}}.$$

При $\Delta x \rightarrow 0$ $H \rightarrow \infty$, поэтому в пределе функция H равна нулю повсюду, кроме точки $x = C$, и равна бесконечности при $x = C$, но при этом стремится к бесконечности таким образом, что волновая функция остается нормированной.

Есть много различных видов функций, приближающихся к собственным функциям оператора x . Например, рассмотрим предел нормированной функции Гаусса

$$\psi = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\exp[-x^2/2(\Delta x)^2]}{\sqrt{2\pi} \Delta x}. \quad (10.34)$$

При $\Delta x \rightarrow 0$ $\psi \rightarrow \infty$, но $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 1$ независимо от Δx . При малых Δx эта функция стремится к функции с острым пиком шириной Δx и высотой $1/\sqrt{2\pi} \cdot \Delta x$.

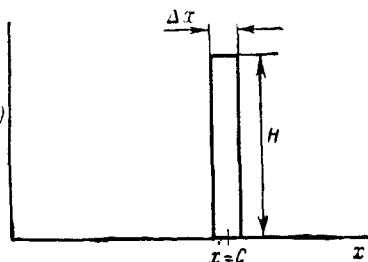


Рис. 26.

Задача 10. Показать, что $\frac{A}{(x-x_0)^2 + (\Delta x)^2}$ стремится к собственной функции χ при $\Delta x \rightarrow 0$. Вычислить константу A так, чтобы нормировать вероятность.

15. Дельта-функция Дирака. Предыдущие собственные функции оператора χ нормированы таким образом, что интегральная вероятность была равна единице. Часто математически удобно использовать собственные функции, нормированные так, чтобы выполнялось условие

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) dx = 1. \quad (10.35)$$

Поэтому для функции, определенной выражением (10.1), мы требуем, чтобы

$$\int_{x_0 - \Delta x/2}^{x_0 + \Delta x/2} H dx = H \Delta x = 1 \quad \text{или} \quad H = \frac{1}{\Delta x}. \quad (10.36)$$

Для функций типа гауссовских

$$\psi = A \exp \left[\frac{-x^2}{2(\Delta x)^2} \right]$$

мы требуем, чтобы

$$A \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\frac{-x^2}{2(\Delta x)^2} \right] dx = 1 \quad \text{или} \quad A = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x}. \quad (10.37)$$

В более общем случае мы рассматриваем любую функцию с острым пиком $S_{\Delta x}(x - x_0)$, которая поддается оценке только в области шириной Δx с центром при $x = x_0$ и которая обладает тем свойством, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} S_{\Delta x}(x - x_0) dx = 1.$$

В пределе при $\Delta x \rightarrow 0$ такая функция стремится к величине, которую Дирак назвал *дельта-функцией* и обозначил ее через $\delta(x - x_0)$. Единственные два важных свойства δ -функции следующие: 1) она равна нулю везде, кроме одной точки, и 2) в этой точке она равна бесконечности, но стремится к бесконечности так, что ее интеграл равен единице.

Строго говоря, δ -функцию нельзя определить в обычном математическом смысле, потому что она должна равняться бесконечности в точке $x = x_0$. Когда мы говорим о δ -функции, то всегда имеем

в виду функцию $S_{\Delta x}(x - x_0)$, которой можно придать форму такого острого пика, какой необходим, сделав Δx достаточно малым. Положение упрощается, если пользоваться δ -функцией так, как если бы она являлась правильной математической функцией обычного типа, помня при этом об ее истинном значении как пределе функции $S_{\Delta x}$ при $\Delta x \rightarrow 0$.

Наиболее важное свойство δ -функции можно получить, рассмотрев интеграл

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) S_{\Delta x}(x - x_0) dx, \quad (10.38)$$

где $f(x)$ — произвольная непрерывная функция. Если Δx достаточно мало, то изменение $f(x)$ в области, где подынтегральная функция значительна, можно сделать как угодно малым. Поэтому функцию $f(x)$ можно заменить постоянным значением $f(x_0)$ и вынести за знак интеграла

$$I \cong f(x_0) \int_{-\infty}^{\infty} S_{\Delta x}(x - x_0) dx = f(x_0). \quad (10.39)$$

При $\Delta x \rightarrow 0$ ошибка такой замены становится сколь угодно малой. Итак, мы получаем

$$f(x_0) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) S_{\Delta x}(x - x_0) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx. \quad (10.40)$$

Задача 11. Показать, что $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{A}{(x - x_0)^2 + (\Delta x)^2}$ при подходящем A можно рассматривать как δ -функцию. Вычислить требуемую величину A и объяснить, почему она отличается от величины, вычисленной в задаче 10.

16. Собственные функции оператора импульса в пространстве импульсов. В пространстве импульсов собственной функцией оператора p , принадлежащей собственному значению p_0 , является δ -функция вида

$$\varphi(p) = \delta(p - p_0). \quad (10.41)$$

Однако в координатном пространстве собственная функция этого оператора была $\exp(ip_0 x/\hbar)$. Поэтому вопрос о том, является ли собственная функция данного оператора непрерывной функцией или δ -функцией, может зависеть от того представления, каким мы пользуемся. Вышеприведенные собственные функции, конечно, не нормированы таким образом, чтобы дать интегральную вероятность, равную единице. О нормировке собственной функции оператора p

в пространстве импульсов можно сказать то же, что о собственных функциях оператора x в координатном пространстве (см. п. 14). Итак, фактически мы имеем дело с функциями, охватывающими малую область импульсов Δp , но эту область можно сделать настолько малой, что в большинстве случаев ею можно просто пренебречь.

17. Собственные функции оператора x в импульсном представлении. До сих пор мы ограничивались координатным представлением, но известно, что в импульсном представлении переменную x можно выразить в виде оператора $i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$. Поэтому собственные функции оператора x определяются из уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial p} = x_0 \varphi, \quad (10.42a)$$

где x_0 — некоторая постоянная координата, не зависящая от p . Решение этого уравнения имеет вид

$$\varphi_x(p) = \exp\left(-\frac{ipx_0}{\hbar}\right). \quad (10.42b)$$

Таким образом, собственные функции x в пространстве импульсов являются плоскими волнами, как и собственные функции p в координатном пространстве. Относительно нормирования следует сделать те же замечания, как и в п. 13. Надо интегрировать в малой области вблизи x_0 , чтобы получить ограниченный пакет в пространстве импульсов. Заметим также, что в координатном пространстве эта маленькая область x_0 соответствует ширине пика функции $S_{\Delta x}(x - x_0)$.

18. Связь между собственными функциями оператора x в координатном пространстве и в пространстве импульсов. Возникает вопрос, имеется ли связь между плоской волной — собственной функцией оператора x в пространстве импульсов и δ -функцией — собственной функцией оператора x в координатном пространстве? На этот вопрос следует ответить положительно. Это можно показать двумя способами. Вычисляя компоненту Фурье $\varphi(k)$ для δ -функции в координатном пространстве, получаем

$$\begin{aligned} \varphi(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ikx) \delta(x - x_0) dx = \frac{\exp(-ikx_0)}{\sqrt{2\pi}} = \\ &= \frac{\exp(-ipx_0/\hbar)}{\sqrt{2\pi}}. \end{aligned} \quad (10.43)$$

Это согласуется с предыдущим выводом, полученным из определения оператора x в пространстве p .

Другой способ решения заключается в задании волновой функции $\varphi(k)$ и нахождении по ней функции $\psi(x)$. Используя для δ -функ-

ции величину $\varphi(k)$ из уравнения (10.43), находим

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(k) e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x_0)} dk. \quad (10.44a)$$

Этот интеграл не существует в обычном смысле. Однако можно найти его предел, если пределы интегрирования стремятся к бесконечности

$$\psi(x) = \lim_{K \rightarrow \infty} \int_{-K}^K \exp[ik(x-x_0)] \frac{dk}{2\pi} = \frac{\sin K(x-x_0)}{\pi(x-x_0)}. \quad (10.44b)$$

График $\psi(x)$ дан на рис. 27, ψ достигает максимума K/π при $x = x_0$ и начинает быстро убывать при $|x - x_0| > 1/K$, колеблясь с периодом $2\pi/K$. Основной вклад $\psi(x)$ в интеграл получается от узкого

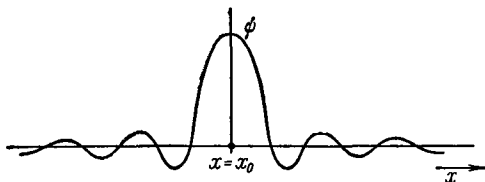


Рис. 27.

интервала вблизи $|(x - x_0)| \leq 1/K$. При $K \rightarrow \infty$ область, в которой функция велика, становится все уже и уже, и поэтому функция приобретает характер δ -функции. Следовательно, можно записать

$$\begin{aligned} f(x) &= \lim_{K \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-K}^K \exp[ik(x-x_0)] f(x_0) dx_0 \frac{dk}{2\pi} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[ik(x-x_0)] f(x_0) dx_0 \frac{dk}{2\pi}. \end{aligned} \quad (10.45)$$

Полученный результат является попросту интегральной теоремой Фурье (см. гл. 3, п. 17). Итак, ясно, что при рассмотрении

$\int_{-\infty}^{\infty} \exp[ik(x-x_0)] dk$ как δ -функции, теорема об интеграле Фурье становится частным случаем применения δ -функции.

19. Дифференцирование δ -функции. На первый взгляд кажется невозможным дифференцировать такую прерывную функцию, какой является δ -функция. Однако учитывая ее определение как предела,

можно придать смысл и ее производной. Так как $S_{\Delta x}(x - x_0)$ является функцией с острым высоким пиком при $x = x_0$, то ее производная представляет собой функцию с острым положительным пиком при значении x , несколько меньшем чем x_0 , и с острым отрицательным пиком при x , несколько большем чем x_0 (рис. 28 и 29).

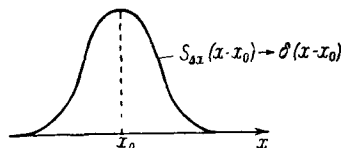


Рис. 28.

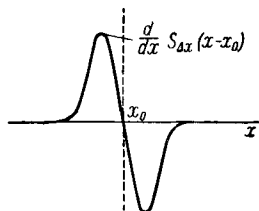


Рис. 29.

Для уяснения смысла дифференцирования функции $\delta(x - x_0)$ в практических применениях запишем

$$f(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} S_{\Delta x}(x - x_0) f(x_0) dx_0, \quad (10.46)$$

$$\frac{df(x)}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dS_{\Delta x}(x - x_0)}{dx} f(x_0) dx_0. \quad (10.47a)$$

Заметим теперь, что

$$\frac{dS_{\Delta x}}{dx} = -\frac{d}{dx_0} S_{\Delta x};$$

$$\frac{df(x)}{dx} = -\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dS_{\Delta x}(x - x_0)}{dx_0} f(x_0) dx_0. \quad (10.47b)$$

Проинтегрируем по частям по x_0 , заметив, что интегрируемая часть исчезает. Получаем

$$\frac{df}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} S_{\Delta x}(x - x_0) \frac{df(x_0)}{dx_0} dx_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) \frac{df(x_0)}{dx_0} dx_0 = \frac{df}{dx}. \quad (10.47b)$$

Таким образом, истинный смысл выражения $\frac{d}{dx} \delta(x - x_0)$, когда оно входит под интегралом, следующий:

$$\frac{df}{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\delta(x - x_0)}{dx} f(x_0) dx_0. \quad (10.47r)$$

$\frac{d\delta(x-x_0)}{dx}$ является функцией, которая, подобно $\delta(x-x_0)$, равна нулю везде, кроме точки $x=x_0$, но так как она имеет форму с двойным пиком (см. рис. 29), то она приближенно означает, что мы вычитаем величину $f(x-\Delta x)$ из величины $f(x+\Delta x)$ и делим на $2\Delta x$, получая при этом в пределе df/dx .

Задача 12. Доказать последовательным дифференцированием, что

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n \delta(x-x_0)}{dx^n} f(x_0) dx_0,$$

и объяснить, что означает это уравнение в терминах $S_{\Delta x}(x-x_0)$ -функции.

20. Дискретный и непрерывный спектр собственных значений операторов. Предположим, что мы имеем частицу, заключенную в ящике длины L . Тогда (в одномерном случае) волновая функция должна исчезать при $x=0$ и $x=L$. Единственные собственные функции оператора $p^2/2m$, для которых это условие выполняется, имеют вид

$$\psi = \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad (10.48a)$$

где n — целое число. Итак, мы получаем

$$\frac{p^2}{2m} \sin \frac{n\pi x}{L} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sin \frac{n\pi x}{L} = \left(\frac{n\pi\hbar}{L} \right)^2 \frac{1}{2m} \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad (10.48b)$$

и следовательно, собственные значения $p^2/2m$ равны в пределе $\left(\frac{n\pi\hbar}{L} \right)^2 \frac{1}{2m}$. Таким образом, мы получили дискретный спектр собственных значений по одному для каждого целого числа n .

В общем случае, всякий раз, когда нужно удовлетворить каким-нибудь граничным условиям, собственные значения оказываются дискретными, как и в вышеприведенном примере. С другой стороны, для свободного пространства без каких бы то ни было границ возможны все положительные значения $p^2/2m$, и спектр получается непрерывным. Это тоже общее правило: если нет граничных условий, ограничивающих область, где волновая функция велика, то операторы обычно имеют непрерывный спектр. В некоторых случаях, например для атома водорода, часть спектра, как мы увидим, дискретна, а часть — непрерывна. Дискретная часть спектра соответствует различным квантовым состояниям атома водорода; непрерывная часть соответствует состояниям ионизованного атома.

Любой непрерывный спектр можно рассматривать как предел дискретного спектра, в котором ограничивающие потенциальные барьеры удалены на бесконечность. Например, в случае свободной частицы в ящике, если стремиться в пределе $L \rightarrow \infty$, то расстояния

между энергетическими уровнями будут стремиться к нулю, и спектр будет стремиться к непрерывному.

21. Разложение произвольной функции в ряд по собственным функциям. Математическая теорема, приводимая здесь без доказательства, утверждает, что произвольную функцию можно разложить в ряд, включающий все собственные функции любого эрмитовского оператора, удовлетворяющего определенным условиям регулярности, которые здесь не приводятся.

Более точно теорема гласит следующее: пусть A — эрмитовский оператор, удовлетворяющий условиям регулярности, с собственными значениями a и собственными функциями ψ_a . Тогда при подходящем выборе коэффициентов можно разложить произвольную (достаточно регулярную) функцию $f(x)$ в ряд вида

$$f(x) = \sum_a C_a \psi_a(x). \quad (10.49)$$

Суммирование здесь проводится по всем возможным значениям a . Если A обладает непрерывным рядом собственных значений, то сумма заменяется интегралом

$$f(x) = \int C(a) \psi_a(x) da. \quad (10.50a)$$

Если A обладает и дискретными, и непрерывными собственными значениями, то производится суммирование по всем дискретным величинам и интегрирование по всем непрерывным величинам.

Примеры. а) $\sin(px/\hbar)$ — собственная функция эрмитовского оператора $p^2/2m$. В ящике (см. п. 20) единственно возможными значениями p являются $p = \hbar\pi n/L$, где L — размер ящика, а n — целое число. Наша теорема гласит, что можно разложить любую волновую функцию, обращающуюся в нуль на стенках ящика, следующим образом:

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \sin \frac{n\pi x}{L}. \quad (10.50б)$$

Но это как раз ряды Фурье, в которых величина ψ ограничена нулем на границах при $x=0$ и $x=L$. Мы уже знаем, что такими рядами Фурье можно выразить произвольную функцию этого типа. Поэтому разложение Фурье — это частный случай общей теоремы разложения.

б) $\exp(ipx/\hbar)$ — собственная функция эрмитовского оператора p . В свободном пространстве допустимы все значения p , поэтому величины p непрерывны. Теорема разложения утверждает, что

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} C(p') \exp\left(\frac{ip'x}{\hbar}\right) dp'. \quad (10.50в)$$

Это — интеграл Фурье, который также является частным случаем теоремы разложения *).

в) Собственными функциями оператора x являются функции $\delta(x - x_0)$. Они образуют непрерывный ряд собственных функций, один для каждого значения x_0 . По теореме разложения имеем

$$\psi(x) = \int \psi(x_0) \delta(x - x_0) dx_0. \quad (10.50r)$$

Мы уже видели из определения δ -функции, что это уравнение справедливо, следовательно, его можно рассматривать как частный случай теоремы разложения.

Позже, встречаясь с собственными функциями более сложных операторов, по теореме разложения мы построим новые типы рядов. Последние аналогичны рядам и интегралам Фурье, но включают новые функции, например функции Бесселя, полиномы Лежандра, эрмитовские полиномы и др.

22. Постулат разложения. Поскольку определение условий, при которых возможно разложение функции, довольно сложно и не вполне разработано, то может быть лучше заменить теорему разложения следующим постулатом: *свойством каждого эрмитовского оператора, представляющего некоторую наблюдаемую величину в квантовой теории, является возможность разложения в ряд по собственным функциям этого оператора любой произвольной подходящей волновой функции.*

Действительно, все такого рода операторы, известные в настоящее время, обладают этим свойством. Как мы увидим, это свойство так близко связано с основами интерпретации квантовой теории, что если будут обнаружены отступления от него, то понадобятся фундаментальные изменения в теории. Поэтому сейчас целесообразно постулировать его справедливость. (Дальнейшее обоснование этого постулата будет дано в п. 29.)

23. Теорема о вещественности собственных значений эрмитовского оператора. Теорема доказывается весьма просто. Так как среднее значение эрмитовского оператора вещественно при любой произвольной функции, то оно должно быть вещественно и для собственной функции. Итак, если O — эрмитовский оператор, то интеграл

$$\int \psi_a^* O \psi_a dx = a \int \psi_a^* \psi_a dx = a \quad (10.51)$$

должен быть вещественным при условии, что ψ_a — собственная функция.

24. Ортогональность собственных функций эрмитовского оператора. Предположим, что ψ_a и ψ_b — различные собственные функции одного и того же эрмитовского оператора O , принадлежащие

*) Можно обобщить эти результаты: функция, удовлетворяющая определенным граничным условиям, разлагается в ряд по собственным функциям, которые удовлетворяют тем же граничным условиям, если только эти условия линейны, как это всегда бывает в квантовой теории.

соответственно собственным значениям a и b . Можно показать, что если a и b — разные собственные значения, то

$$\int \psi_a^* \psi_b dx = 0. \quad (10.52)$$

Все функции, удовлетворяющие этому соотношению, называются ортогональными. Докажем ортогональность собственных функций, принадлежащих различным собственным значениям.

Для этого рассмотрим следующий интеграл:

$$I = \int \psi_a^* O \psi_b dx = \int \psi_a^* b \psi_b dx. \quad (10.53a)$$

Поскольку O — эрмитовский оператор, имеем также

$$I = \int \psi_b O^* \psi_a^* dx. \quad (10.53б)$$

Так как собственные значения O вещественны, то

$$O^* \psi_a^* = a^* \psi_a^* = a \psi_a^*,$$

$$I = a \int \psi_a^* \psi_b dx. \quad (10.53в)$$

Приравнивая два значения I , получаем

$$(a - b) \int \psi_a^* \psi_b dx = 0. \quad (10.53г)$$

Если $a \neq b$, то $\int \psi_a^* \psi_b dx = 0$, т. е. ψ_a и ψ_b ортогональны. Если же $a = b$, то нельзя сделать никаких определенных заключений.

Примеры. а) Как мы видели, в рядах Фурье каждый член $\sin(n\pi x/L)$ является собственной функцией эрмитовского оператора $p^2/2m$. Наша теорема утверждает, что $0 = \int_0^L \sin(n\pi x/L) \sin(m\pi x/L) dx$, если $m \neq n$. Но это

было уже известно при рассмотрении рядов Фурье. Поэтому ортогональность с точки зрения рядов Фурье — частный случай нашей общей теоремы (см. гл. 1, п. 5).

б) Возможные две собственные функции оператора $p^2/2m$ (для случая свободной частицы) $\exp(ipx/\hbar)$ и $\sin(px/\hbar)$ принадлежат одному и тому же собственному значению оператора $p^2/2m$. Простое вычисление показывает, что они не ортогональны. Это — пример отсутствия ортогональности при двух одинаковых собственных значениях. Но неортогональность двух собственных функций, принадлежащих одному и тому же собственному значению, необязательна. Например, функции $\exp(ipx/\hbar)$ и $\exp(-ipx/\hbar)$ принадлежат одному и тому же собственному значению оператора $E = p^2/2m$, но, как показывает простой расчет, они все же ортогональны. Таким образом, равенство собственных значений еще не указывает на ортогональность собственных функций.

Задача 13. Рассмотреть ящик размера L с периодическими граничными условиями. Допустимые собственные функции оператора p в этом случае равны $\exp(-i2\pi nx/L)$ при $p = 2\pi n\hbar/L$. Доказать ортогональность собственных функций, принадлежащих различным собственным значениям оператора p .

25. Вычисление коэффициентов разложения. Рассмотрим разложение в ряд по нормированным собственным функциям оператора A . Предположим для простоты, что возможные собственные значения дискретны, хотя тот же метод применим и к непрерывному спектру. Тогда получаем

$$\psi = \sum_a C_a \psi_a. \quad (10.54)$$

Умножим затем (10.54) на ψ_b^* и проинтегрируем по всему объему.

В силу того, что $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_b^* \psi_a dx = 0$ при $a \neq b$ и единице при $a = b$, получаем

$$C_b = \int \psi_b^* \psi_a dx. \quad (10.55)$$

Если функция задана, то это уравнение позволяет вычислить коэффициенты разложения C_b . Вычисление коэффициентов Фурье — частный случай этой теоремы.

26. Разложение δ -функции Дирака в ряд по собственным функциям произвольного эрмитовского оператора. Полученный выше результат можно сразу же применить для получения более общего (чем уже имелось выше) выражения δ -функции Дирака. По теореме разложения имеем

$$\delta(x - x_0) = \sum_a f(a) \psi_a(x), \quad (10.56)$$

где ψ_a — нормированная собственная функция эрмитовского оператора A , соответствующая собственному значению a .

Для решения уравнения относительно $f(a)$ умножим его на $\psi_a^*(x)$ и проинтегрируем по x . Из соотношений ортогональности и из условия $\int \psi_a^* \psi_a dx = 1$ получаем

$$f(a) = \int \psi_a^*(x) \delta(x - x_0) dx = \psi_a^*(x_0) \quad (10.57)$$

и

$$\delta(x - x_0) = \sum_a \psi_a^*(x_0) \psi_a(x). \quad (10.58a)$$

Для непрерывного спектра собственных значений имеем

$$\delta(x - x_0) = \int \psi_a^*(x_0) \psi_a(x) da. \quad (10.58b)$$

Это очень полезный вывод, который будет часто использоваться ниже.

Как пример можно привести разложение оператора p по собственным функциям, что, как мы видели, приводит к разложению Фурье для волновой функции. Применяя (10.58а), например, к волновым функциям, определенным так, что они являются периодическими в ящике со стороной L , получим

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{L} \sum_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\frac{2\pi i n (x - x_0)}{L} \right]. \quad (10.59)$$

Задача 14. Используя функцию $y_N(x - x_0) = \frac{1}{L} \sum_N \exp \left[\frac{2\pi i n (x - x_0)}{L} \right]$,

показать, что

$$\lim_{N \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} y_N(x - x_0) \psi(x_0) dx_0 = \psi(x).$$

Следовательно, использование бесконечной суммы как δ -функции законно.

27. Представление оператора через его собственные функции.

Если разложить ψ в ряд по собственным функциям оператора A , то можно получить очень простое выражение и для функции $A\psi$. Действие оператора A на каждую собственную функцию является просто умножением на соответствующее собственное значение a . Итак, если $\psi = \sum_a C_a \psi_a$, то

$$A\psi = \sum_a a C_a \psi_a, \quad (10.60a)$$

$$A^n \psi = \sum_a a^n C_a \psi_a. \quad (10.60б)$$

Тогда для произвольной функции от A :

$$f(A)\psi = \sum_a f(a) C_a \psi_a. \quad (10.60в)$$

Пример. Разложение ψ по собственным функциям оператора импульса p :

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p) \exp \left(\frac{ipx}{\hbar} \right) dp, \quad (10.61a)$$

$$p\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} p \varphi(p) \exp \left(\frac{ipx}{\hbar} \right) dp, \quad (10.61б)$$

$$f(p)\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(p) \varphi(p) \exp \left(\frac{ipx}{\hbar} \right) dp. \quad (10.61в)$$

Уравнение (10.60в) позволяет очень просто показать, как действует оператор на произвольную волновую функцию ψ и таким

образом «представить» оператор посредством ряда численных операций. Этот процесс является обобщением того, что производилось выше, например, в импульсном представлении, когда оператор p выражался просто числом p , которое умножается на собственную функцию $\exp(ipx/\hbar)$. Аналогично в координатном представлении оператор x выражался просто числом x , которое умножается на волновую функцию $\psi(x)$. Каждый эрмитовский оператор A можно выразить через его собственные функции ψ_a , так что его действие сведется к простому умножению ψ_a на число a . Таким образом, от представления только в пространствах импульсов или координат мы приходим к возможности использования более общего пространства, включающего собственные функции любого эрмитовского оператора. Как будет видно позже (см., например, гл. 16), это обобщение очень полезно в связи с матричным выражением квантовой теории.

Одно из наиболее важных преимуществ описанного выше способа выражения операторов заключается в том, что он позволяет обобщить определение функции оператора на те случаи, когда эту функцию невозможно выразить в виде степенного ряда. Поэтому уравнение (10.60в) можно рассматривать как определение произвольной функции оператора, и таким путем можно избежать перехода к функциям, которые представляются в виде степенных рядов. Однако, выбирая вначале метод степенных рядов, мы преследовали цель дать формулировку квантовой теории в более естественной форме, чем та, которая была бы возможна, если сразу же исходить из наиболее общего метода представления.

28. Выражение среднего значения функции $f(A)$ в методе разложения по собственным функциям A . Среднее значение $f(A)$ равно по определению

$$\bar{f}(A) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) f(A) \psi(x) dx. \quad (10.62a)$$

Разложим ψ и ψ^* в ряд по собственным функциям ψ_a , используя тот факт, что

$$f(A) \psi_a = f(a) \psi_a,$$

$$\bar{f}(A) = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_a \sum_{a'} C_a^* C_{a'} \psi_a^* f(a) \psi_{a'} dx. \quad (10.62б)$$

Используя также соотношение

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_a^* \psi_{a'} dx = \begin{cases} 0, & \text{если } a \neq a', \\ 1, & \text{если } a = a', \end{cases}$$

получаем

$$\bar{f}(A) = \sum_a C_a^* C_a f(a). \quad (10.62в)$$

29. Физическая интерпретация коэффициентов разложения с помощью вероятностей. Уравнение (10.62в) дает основу для простого физического истолкования выражения $C_a^* C_a$. Для этого обратим внимание на возможность иного выражения величины $\bar{f}(A)$ с помощью $P(a)$, где $P(a)$ — вероятность того, что при измерении для переменной A будет получено численное значение a , соответствующее определенной собственной функции ψ_a . Это выражение имеет вид

$$\bar{f}(A) = \sum_a P(a) f(a). \quad (10.63)$$

Если приравнять выражения (10.62в) и (10.63), то для произвольных функций $f(a)$ с необходимостью следует, что

$$P(a) = C_a^* C_a. \quad (10.64)$$

Итак, мы показали, что произведение $C_a^* C_a$ равно вероятности того, что при измерении система будет находиться в таком состоянии, в котором переменная A имеет точное численное значение a .

Пример. В разложении $\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p) \exp(ipx/\hbar)$ вероятность того, что импульс заключен в пределах между p и $p + dp$, равна $P(p) = \varphi^*(p) \varphi(p) dp/2\pi$. (Заметим, что $(2\pi)^{-1/2} \varphi(p)$ — коэффициент разложения ψ в ряд по собственным функциям оператора p .)

Это чрезвычайно важный вывод, позволяющий распространить определение вероятности на более широкий класс наблюдаемых величин, чем только положение и импульс. Так, если A положить равным оператору Гамильтона, то ψ_a выражает волновую функцию, соответствующую определенному энергетическому состоянию, а $C_a^* C_a$ — вероятность того, что система обладает этой энергией *).

Мы видим, что именно постулат разложения (п. 22) допускает возможность такой интерпретации $|C_a|^2$. Если бы отсутствовала возможность разложения произвольной функции ψ в ряд по собственным функциям ψ_a , то большая часть нашего метода истолкования волновой функции оказалась бы неудовлетворительной. Поэтому общие требования последовательности и единства теории подсказывают нам, что при отсутствии противоречия с опытом можно постулат разложения с уверенностью рассматривать как определение или критерий, которому должен удовлетворять любой оператор, прежде чем мы сочтем его подходящим для наблюдаемой величины в квантовой теории. Поэтому тот факт, что все известные ныне наблюдаемые величины удовлетворяют этому критерию, является опытным подтверждением правильности постулата разложения.

*) Этот результат обосновывает качественное рассмотрение переходов между орбитами, данное в гл. 3, п. 16.

Дальнейшее истолкование вероятностей в квантовой теории

30. Интерференция вероятностей. Представим себе систему в таком состоянии, что оператор A имеет собственное значение a , а волновая функция равна $\psi_a(x)$. Тогда вероятность найти частицу в точке x равна

$$P_a(x) = \psi_a^*(x) \psi_a(x). \quad (10.65)$$

Это означает, что если имеется большое количество эквивалентных систем, в которых наблюдаемая величина A имеет одно и то же определенное значение a , и если затем у этих систем последовательно измерять координату x , то величина $P_a(x)$ дает вероятность того, что при этом будет получена именно величина x . Аналогично, если имеются системы с наблюдаемой величиной A , равной другому численному значению b , так что волновая функция равна $\psi_b(x)$, то вероятность найти определенную величину x равна

$$P_b(x) = \psi_b^*(x) \psi_b(x). \quad (10.66)$$

Рассмотрим теперь систему, в которой наблюдаемая величина A может иметь значения или a , или b соответственно с вероятностями Q_a и Q_b (причем $Q_a + Q_b = 1$). Согласно классической физике вероятности надо складывать

$$P(x) = Q_a P_a(x) + Q_b P_b(x). \quad (10.67)$$

Однако в квантовой теории новая вероятность связана со старой не так просто. Вместо сложения вероятностей надо по гипотезе линейной суперпозиции складывать волновые функции. Составная волновая функция равна

$$\psi = C_a \psi_a(x) + C_b \psi_b(x), \quad (10.68)$$

где C_a и C_b — константы, которые надо определить. По уравнению (10.64)

$$Q_a = C_a^* C_a \quad \text{и} \quad Q_b = C_b^* C_b.$$

Следовательно, имеем

$$C_a = (Q_a)^{1/2} e^{i\varphi_a} \quad \text{и} \quad C_b = (Q_b)^{1/2} e^{i\varphi_b},$$

где φ_a и φ_b — фазовые факторы, которые *нельзя определить, зная только Q_a и Q_b* . Позже будет обсужден вопрос о том, что в действительности определяют эти фазовые факторы.

Мы получаем

$$\begin{aligned} P(x) = \psi^*(x) \psi(x) = & C_a^* C_a \psi_a^*(x) \psi_a(x) + C_b^* C_b \psi_b^*(x) \psi_b(x) + \\ & + C_a^* C_b \psi_a^*(x) \psi_b(x) + C_b^* C_a \psi_b^*(x) \psi_a(x). \end{aligned} \quad (10.69a)$$

Это можно переписать следующим образом:

$$P(x) = Q_a P_a(x) + Q_b P_b(x) + (Q_a Q_b)^{1/2} [e^{i(\varphi_b - \varphi_a)} \psi_a^*(x) \psi_b(x) + e^{-i(\varphi_b - \varphi_a)} \psi_a(x) \psi_b^*(x)]. \quad (10.69б)$$

Мы видим, что кроме членов, предсказываемых классически, в $P(x)$ входят дополнительные члены, которые являются результатом интерференции $\psi_a(x)$ и $\psi_b(x)$. Разность фаз между двумя разными частями волновой функции определяет величину интерференционных членов способом, который совершенно чужд классическим вероятностям. Далее повсюду будет более детально выясняться, как эти фазовые различия определяются точной физической картиной. Теперь же мы просто укажем, что поскольку физически наблюдаемое распределение вероятностей зависит от разности фаз $\varphi_a - \varphi_b$, то эта разность фаз является в общем случае наблюдаемой величиной, даже если сама по себе абсолютная величина фазы не имеет физического смысла. Поэтому разность фаз между различными частями волновой функции является важной величиной, природа которой более подробно изучается позже. В связи с этим см. гл. 6, где мы пришли к аналогичным выводам.

31. Собственные функции оператора Гамильтона. Так как оператор Гамильтона является эрмитовским, то можно, в соответствии с постулатом разложения, разложить произвольную функцию в ряд по его собственным функциям

$$\psi(x) = \sum_E C_E \psi_E(x), \quad (10.70)$$

где $\psi_E(x)$ — собственная функция H , принадлежащая собственному значению E . Поскольку функция Гамильтона равна полной энергии системы, ясно, что собственное состояние оператора H — это такое состояние, в котором энергия точно определена и равна E .

32. Изменение собственных функций H со временем. Каждая собственная функция H должна удовлетворять волновому уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \psi_E}{\partial t} = H \psi_E, \quad (10.71а)$$

но

$$H \psi_E = E \psi_E.$$

Итак, получаем уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \psi_E}{\partial t} = E \psi_E, \quad (10.71б)$$

решением которого является

$$\psi_E = (\psi_E)_{t=0} e^{-iEt/\hbar}. \quad (10.71в)$$

Следовательно, собственные функции H гармонически колеблются с частотой, определяемой соотношением $2\pi\nu = E/\hbar$ или $\nu = E/\hbar$, которое и есть как раз соотношение де Бройля. Это согласуется с тем, что было использовано в задаче о свободной частице (см. уравнение (3.28)).

33. Изменение вероятности со временем. Стационарные состояния. Вероятность $P(x)$ для собственного состояния гамильтониана равна

$$P(x) = \psi_E^*(x) \psi_E(x) = (\psi_E^*)_{t=0} (\psi_E)_{t=0}. \quad (10.72)$$

Отметим, что $P(x)$ не зависит от времени. Аналогично можно показать, используя разложение Фурье, что $P(k)$ также постоянна. Для состояния, в котором энергия точно определена, все вероятности не зависят от времени; такое состояние является *стационарным*. Так, когда атом находится в состоянии с заданной энергией, вероятность любого опытного результата не зависит от времени проведения опыта. Если, например, мы измеряем положение электрона в стационарном состоянии, то получаемые результаты будут флуктуировать от одного опыта к следующему. Но вероятность получить данное значение не будет зависеть от промежутка времени, которое прошло с момента образования этого состояния. Это противоположно случаю, например, волнового пакета, который движется в пространстве и расплывается, так что вероятность данного положения меняется со временем.

Из вышесказанного ясно, что когда электрон находится в состоянии с определенной энергией, соответствующей некоторой боровской орбите, то вероятность любого опытного результата остается постоянной. Однако если атом находится в возбужденном состоянии, то он излучает энергию и переходит в состояние с более низкой энергией, так что возбужденное состояние фактически не является вполне стационарным. Возбужденные состояния стационарны только в той степени, в которой можно пренебречь излучением. Позже, когда будет построена более полная теория, мы покажем, как точно учесть изменения функции ψ , возникающие из-за возможности излучения (гл. 18). Теперь же просто отметим, что возбужденное состояние сохраняется в течение некоторого среднего времени τ , зависящего от скорости излучения. Как показывает уравнение (2.54), вероятность того, что система не излучает, равна $P = e^{-t/\tau}$; ею можно пренебречь вскоре после $t = \tau$.

34. Связь вероятностей, зависящих от времени, с соотношением неопределенностей. Если атом на определенной боровской орбите излучает свет за время порядка τ , то частота света будет неопределенной в пределах $\Delta\omega \cong 1/\tau$ (см. гл. 5, пп. 2 и 11). Поэтому энергия становится неопределенной в интервале $\Delta E = \hbar \Delta\omega \cong \hbar/\tau$. Это новый пример соотношения неопределенностей. Чтобы показать справедливость этого положения, заметим, что поскольку квант

практически наверняка излучается за время порядка τ , то можно определить время излучения с этой точностью из того простого факта, что излучение произошло. Итак, мы получили грубую оценку времени, а энергия должна иметь соответствующую неопределенность. Это означает просто, что энергия возбужденного состояния атома, поскольку он может излучать, делается существенно неопределенной в пределах $\Delta E \cong \hbar/\tau$.

Если имеется много атомов в возбужденном состоянии, то энергии, излучаемые каждым из них, будут различны, и их величина будет флуктуировать в интервале $\Delta E \cong \hbar/\tau$. В результате спектральная линия будет иметь конечную ширину $\Delta\nu \cong 1/\tau$, которая называется *естественной шириной линии*; сделать линию более узкой невозможно, даже если учесть все эффекты, такие, как смещение Доплера, расширение линий, вызванное соударениями, и т. д.

Задача 15. а) Какова ширина линии для первого возбужденного состояния атома водорода? (См. задачу 13 гл. 2.) Выразить ее через энергию и частоту.

б) Какая необходима температура, чтобы сделать доплеровское уширение меньшим, чем у водорода? у ртути?

в) Когда возбужденный атом сталкивается с невозбужденным, энергия возбуждения обычно передается другому атому. Таким образом, время жизни возбужденного состояния первого атома сокращается. Если l — средняя длина свободного пробега, а v — средняя скорость атома, то время между столкновениями равно l/v . У водорода при атмосферном давлении свободный пробег для такого перехода равен примерно 10^{-4} см.

Насколько низкое давление необходимо, чтобы сделать этот тип расширения, вызванного столкновениями, меньшим, чем естественная ширина линии при комнатной температуре? при 10°K ? Допустив такой же свободный пробег для атомов ртути, определить, какое давление нужно для ртути при комнатной температуре?

35. Важность собственных функций гамильтоновского оператора H . Собственные состояния энергии особенно важны не только потому, что мы встречаемся со многими системами, имеющими определенную энергию, но и потому, что волновую функцию произвольной системы, состояния которой зависят от времени, можно разложить в ряд по собственным функциям оператора H . Так, положив $\psi_E = (\psi_E)_{t=0} e^{-iEt/\hbar}$ в уравнении (10.70), получим

$$\psi(x, t) = \sum_E C_E [\psi_E(x)]_{t=0} \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right). \quad (10.73)$$

Таким образом, если известно разложение $\psi(x)$ при $t=0$, то предыдущее уравнение дает требуемую величину $\psi(x)$ в любой момент времени t . Собственные функции оператора Гамильтона особенно важны при решении вопроса о скорости изменения волновой функции во времени, когда известно ее начальное значение. Поэтому задача

нахождения собственных функций H является одной из основных проблем всей квантовой теории; найдя все эти функции, мы получаем общее решение волнового уравнения как функцию времени, соответствующее уравнению (10.73).

36. Изменение вероятности со временем для общей волновой функции. Из уравнения (10.72) имеем

$$P(x) = \psi^*(x)\psi(x) = \sum_E \sum_{E'} (\psi_{E'}^*)_{t=0} (\psi_E)_{t=0} C_{E'}^* C_E \exp\left[-\frac{i(E-E')t}{\hbar}\right]. \quad (10.74)$$

В общем случае $P(x)$ является функцией времени. Только члены с $E=E'$ не зависят от времени. В качестве примера рассмотрим случай, когда все C_E равны нулю, кроме двух, а именно C_{E_1} и C_{E_2} . Тогда будем иметь

$$\psi = C_{E_1} (\psi_{E_1})_{t=0} \exp\left(-\frac{iE_1 t}{\hbar}\right) + C_{E_2} (\psi_{E_2})_{t=0} \exp\left(-\frac{iE_2 t}{\hbar}\right), \quad (10.75)$$

$$\begin{aligned} P(x) = & C_{E_1}^* C_{E_1} [\psi_{E_1}^*(x) \psi_{E_1}(x)]_{t=0} + C_{E_2}^* C_{E_2} [\psi_{E_2}^*(x) \psi_{E_2}(x)]_{t=0} + \\ & + C_{E_1}^* C_{E_2} [\psi_{E_1}^*(x) \psi_{E_2}(x)]_{t=0} \exp\left[-\frac{i(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right] + \\ & + C_{E_2}^* C_{E_1} [\psi_{E_2}^*(x) \psi_{E_1}(x)]_{t=0} \exp\left[-\frac{i(E_1 - E_2)t}{\hbar}\right]. \end{aligned} \quad (10.76)$$

Ясно, что в $P(x)$ имеется слагаемое, не зависящее от времени, и слагаемое, которое колеблется с частотой $\nu = (E_1 - E_2)/\hbar$.

Очень важно, что квантовая теория описывает изменение вероятности со временем членами, отображающими интерференцию различных стационарных состояний. Поэтому движение описывается существенно неклассическим путем. Изменение каждой индивидуальной вероятности распределения выражается просто изменением фазовых соотношений между различными компонентами волновой функции, соответствующими различным стационарным состояниям. Здесь приводился простой случай, когда разность фаз между двумя стационарными состояниями имеет физический смысл, а именно эта разность фаз определяет изменение вероятности со временем. Так как процесс движения описывается через интерференцию волновых функций, принадлежащих различным энергиям, то изменение вероятностей возможно только, если имеется некоторая определенная область энергий или, другими словами, если энергия имеет некоторую неопределенность. Таким образом, соотношение неопределенностей между энергией и временем автоматически включается в теорию.

Аналогичный результат был получен в гл. 3, пп. 4 и 13, где было показано, что движение волновых пакетов вызывается перемещением

интерферирующих волн с различными волновыми числами k ; это перемещение обусловлено изменением фазовых соотношений вследствие зависящего от времени фазового множителя $\exp(-i\hbar k^2 t/2m)$ (см. уравнение (3.21)). В общем случае способ изменения волновой функции со временем определяется видом оператора Гамильтона. Поэтому об операторе Гамильтона можно сказать, что он содержит законы причинности в той мере, в какой они имеют значение в квантовой теории.

ПРИЛОЖЕНИЯ К ПРОСТЫМ СИСТЕМАМ. ДАЛЬНЕЙШИЕ ОБОБЩЕНИЯ ФОРМУЛИРОВКИ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

ГЛАВА II

РЕШЕНИЕ ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПРЯМОУГОЛЬНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

1. Введение к части III. В части III физические представления, изложенные в части I, и математический аппарат, развитый в части II, будут использованы для решения различных элементарных задач, начиная от простейших случаев и постепенно переходя к более сложным системам. Мы начнем с одномерной задачи, в которой пространство разделено на конечное число областей, в каждой из которых потенциал постоянен, но отличается по величине от потенциалов других областей. На этой простой задаче можно проиллюстрировать многие важные специфические квантовомеханические эффекты, например, проникновение через потенциальный барьер, отражение электронных волн от резких изменений потенциала, связь частиц в ограниченной области под действием сил притяжения.

Следующая задача покажет, как уравнение Шрёдингера приводит к результатам, близким к результатам классической физики в предельном случае больших квантовых чисел. Это будет сделано с помощью приближения ВКБ (Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна). В этой задаче более ясно видна глубокая связь между классической и квантовой теорией. Приближение ВКБ будет также применено для задачи расчета времени жизни возбужденных состояний атомных ядер.

С помощью такой трактовки мы попытаемся дать простой и наглядный метод для качественного рассмотрения влияния различных сил на волновую функцию. Автор надеется, что таким путем читатель лучше увидит качественную картину, которая позволит ему представить себе общий характер волновой функции и в более сложных задачах, не решая точно соответствующие им математические уравнения. В простых случаях гармонического осциллятора и атома водорода мы будем сравнивать результаты приближенных оценок с точными решениями уравнений.

Наконец мы введем матричную формулировку квантовой теории и используем ее в задаче о спине электрона.

2. Собственные функции оператора энергии. Аналогия с показателем преломления в оптике. В гл. 10, п. 35 было показано, что решения уравнения Шрёдингера, являющиеся собственными функциями оператора Гамильтона, весьма важны не только потому, что многие системы, встречающиеся на практике, имеют определенную энергию, но также и потому, что временная зависимость этих собственных функций имеет особенно простую форму

$$\psi = \psi_E(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right). \quad (11.1)$$

Когда система обладает определенной энергией, все вероятности постоянны и поэтому состояние стационарно. Решение уравнения Шрёдингера в общем случае может быть получено как линейная комбинация вышеуказанных стационарных решений.

В части III мы будем заниматься главным образом расчетом собственных функций оператора Гамильтона; иными словами, решать уравнение

$$H\psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x)\psi = E\psi,$$

т. е. находить допустимые значения E , для которых соответствующие функции ψ_E удовлетворяют всем граничным условиям для волновой функции. Наше уравнение можно записать следующим образом:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi = 0. \quad (11.2)$$

В оптике волновое уравнение для волны с определенной угловой частотой ω может быть записано в такой форме:

$$\nabla^2 A + \frac{\omega^2}{c^2} n^2 A = 0, \quad (11.3)$$

где n — показатель преломления. Следовательно, волновое уравнение для ψ похоже на волновое уравнение для света в среде, где

$$n^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \frac{c^2}{\omega^2}, \quad (11.4)$$

или, иными словами, в среде, для которой n есть функция координаты. Это очень полезная аналогия, к которой мы будем часто прибегать.

3. Прямоугольные потенциальные барьеры. В общем случае потенциальная энергия $V(x)$ может быть произвольной функцией координаты x . Уравнения особенно просто решаются, когда потенциал V постоянен во всех точках некоторой области (например, от $x=a$ до $x=b$), затем в следующей области он принимает некоторое иное значение (например, от $x=b$ до $x=c$), потом опять

другое значение в третьей области и т. д. Пример такого потенциала представлен графически на рис. 30. Он называется «прямоугольным потенциалом» из-за прямых углов на его графике. Фактически в природе не существует потенциалов, которые действительно являются прямоугольными, так как это означало бы существование бесконечной силы в точках скачков потенциала. Все же прямоугольные потенциалы дают грубое представление о многих действительных системах, а простота их математического выражения позволяет использовать их для некоторых выводов, которые, по крайней мере качественно, приложимы к таким системам. Например, взаимная потенциальная энергия двух молекул имеет общий вид, показанный на рис. 31. Многие свойства волновых функций молекул могут быть поняты качественно с помощью прямоугольного потенциала

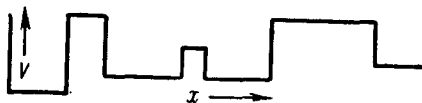


Рис. 30.

Например, взаимная потенциальная энергия двух молекул имеет общий вид, показанный на рис. 31. Многие свойства волновых функций молекул могут быть поняты качественно с помощью прямоугольного потенциала

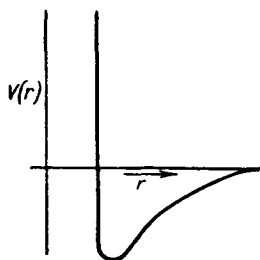


Рис. 31.

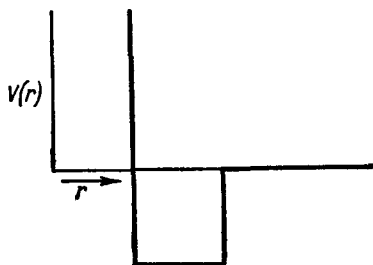


Рис. 32.

(рис. 32), который включает два существенных свойства силы, а именно притяжение, когда молекулы находятся на умеренных расстояниях, и отталкивание, когда они очень близки. Надо заметить, однако, что те свойства молекул, которые зависят от точной формы кривой на рис. 31 (например, коэффициент теплового расширения), вообще не могут быть объяснены с помощью такого упрощенного потенциала. С другой стороны, этот метод дает грубое приближение при расчете энергетических уровней.

Другой тип сил, который может быть достаточно хорошо представлен прямоугольным потенциалом, это силы между ядерными частицами, такими, как протоны и нейтроны. Сила взаимодействия между протоном и нейтроном, например, характеризуется двумя свойствами:

1) Она действует заметно только на очень близких расстояниях порядка $2 \cdot 10^{-13}$ см. То, что это расстояние действительно мало,

видно из сравнения с радиусом атома, который равен величине порядка $2 \cdot 10^{-8}$ см.

2) Эта сила очень велика в пределах радиуса своего действия — гораздо больше, чем силы, действующие между атомами.

Из опытов по рассеянию ядерных частиц можно получить грубое представление о форме кривой потенциальной энергии взаимодействия между нейтроном и протоном (см. гл. 21, п. 56, а также [26], гл. 4). Она более или менее такова, как это показано на рис. 33. В первом

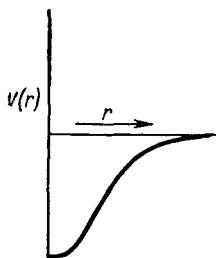


Рис. 33.

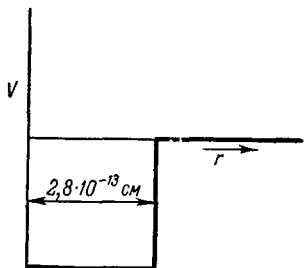


Рис. 34.

приближении, однако, потенциал может быть представлен прямоугольным потенциалом (рис. 34). Ширина этой потенциальной ямы составляет $2,8 \cdot 10^{-13}$ см, а ее глубина порядка 20 Мэв. Эта глубина резко отличается от энергий молекулярных взаимодействий порядка ~ 2 эв.

4. Решение задачи для прямоугольных потенциалов. В любой области, где потенциал V постоянен, решение волнового уравнения имеет вид

$$\psi_E = A \exp \left[i \sqrt{2m(E - V)} \frac{x}{\hbar} \right] + B \exp \left[-i \sqrt{2m(E - V)} \frac{x}{\hbar} \right], \quad (11.5)$$

где A и B — произвольные постоянные. Решение, зависящее от времени, имеет вид

$$\psi = A \exp \left[\frac{i(px - Et)}{\hbar} \right] + B \exp \left[\frac{-i(px + Et)}{\hbar} \right], \quad (11.6)$$

где $p = \sqrt{2m(E - V)}$. Ясно, что первый член представляет волну, распространяющуюся вправо, а второй член — волну, бегущую влево.

При переходе от одной области к другой V меняется, и при этом меняется также длина волны. На границе между областями должны соблюдаться определенные граничные условия. Так как дифференциальное уравнение задачи относительно x второго порядка, то необходимо, чтобы функция ψ и ее первая производная были непрерывны на границах. Это следует из того факта, что ψ , E и V принимаются конечными. Функция ψ должна быть конечной, ибо

только при этом ее физическая интерпретация как вероятности имеет смысл; величины E и V также должны быть конечны, так как бесконечных энергий не бывает в природе. Из дифференциального уравнения (11.2) видно, что производная $d^2\psi/dx^2$ всегда ограничена (но не обязательно непрерывна). Но $d^2\psi/dx^2$ может быть ограниченной, только если $d\psi/dx$ непрерывна. Так получается первое граничное условие. Однако для того, чтобы $d\psi/dx$ существовало повсюду, согласно простой теории дифференциальных уравнений, необходима также непрерывность функции ψ . Это дает второе граничное условие.

Проиллюстрируем применение этих граничных условий с помощью простой задачи, в которой потенциал испытывает только одно скачкообразное изменение, как это показано на рис. 35.

Случай $A(E > V)$.

Предположим, что электроны с некоторой энергией E приходят слева и что $E > V$. С точки зрения классической физики мы должны ожидать, что ни один электрон не будет отражаться в точке $x = 0$, так как все они имеют достаточную энергию для проникновения в область $x > 0$. Выясним теперь, что предсказывает квантовая теория при решении этой задачи. Для ответа на этот вопрос используем оптическую аналогию. Электрон действует в некоторой степени подобно волне, которая приходит слева и сталкивается со скачкообразным изменением потенциала (потенциальным барьером) в точке $x = 0$. Это явление эффективно можно описать как внезапное изменение показателя преломления. Так же, как при падении света на стеклянную пластинку, можно считать, что часть волны отражается от барьера, а часть проходит через него.

Строгую квантовую трактовку этой задачи мы начнем с падающего волнового пакета, который представляет электрон, идущий слева. Этот пакет подойдет к барьеру и часть его отразится, а часть пройдет дальше. Отраженная часть волнового пакета будет давать вероятность отражения электрона, а прошедшая часть — вероятность его прохождения дальше. Такое решение будет проведено в п. 17 этой главы. Здесь же будет приведено более отвлеченное решение, которое однако приведет нас математически простым путем к тем же результатам. Пакет предполагается таким широким, что падающая волна может быть приближенно представлена волновой функцией $B \exp(ip_1 x/\hbar)$, где $p_1 = \sqrt{2mE}$. Тогда падающая волна даст постоянную во времени плотность вероятности, при которой будет установившийся поток электронов, движущихся вправо. Среднее значение плотности тока вероятности будет $j = |B|^2 p_1/m$. (Чтобы, несмотря на наличие тока, поддерживать постоянную плотность вероятности, необходимо слева непрерывно добавлять электроны.)



Рис. 35.

Имеющуюся также отраженную волну мы запишем так:

$$C \exp(-ip_1 x/\hbar).$$

Полная волновая функция слева от барьера будет равна

$$\psi_1 = B \exp\left(\frac{ip_1 x}{\hbar}\right) + C \exp\left(-\frac{ip_1 x}{\hbar}\right).$$

Амплитуда прошедшей волны будет

$$\psi_2 = A \exp\left(\frac{ip_2 x}{\hbar}\right), \quad \text{где} \quad p_2 = \sqrt{2m(E - V)}.$$

Постоянные A , B и C должны быть теперь определены из граничных условий, согласно которым волновая функция и ее первая производная непрерывны в точке $x = 0$.

Замечая, что

$$\frac{d\psi_2}{dx} = \frac{ip_2}{\hbar} A \exp\left(\frac{ip_2 x}{\hbar}\right)$$

и

$$\frac{d\psi_1}{dx} = \frac{ip_1}{\hbar} \left[B \exp\left(\frac{ip_1 x}{\hbar}\right) - C \exp\left(-\frac{ip_1 x}{\hbar}\right) \right],$$

мы получим, подставляя $x = 0$,

$$A = B + C, \tag{11.7}$$

$$p_2 A = p_1 (B - C). \tag{11.8}$$

Решения для A и C имеют вид

$$A = \frac{2p_1 B}{p_1 + p_2}, \tag{11.9}$$

$$C = \frac{(p_2 - p_1)}{p_1 + p_2} B. \tag{11.10}$$

Таким образом, получены амплитуды отраженной и прошедшей волн, которые обозначены соответственно символами A и C , выраженными через амплитуду падающей волны B . Доля электронов T , которая проходит вправо, равна отношению прошедшего тока к начальному. Поэтому коэффициент прозрачности барьера равен

$$T = \frac{|A|^2}{|B|^2} \frac{p_2}{p_1} = \frac{4p_1 p_2}{(p_1 + p_2)^2}. \tag{11.11}$$

Отражательная способность барьера R равна отношению интенсивностей отраженной и падающей волн

$$R = \frac{|C|^2}{|B|^2} = \frac{(p_1 - p_2)^2}{(p_1 + p_2)^2}. \tag{11.12}$$

Сумма отражательной способности и прозрачности должна быть по определению равна единице. Для подтверждения этого напишем

$$T + R = \frac{(p_1 - p_2)^2 + 4p_1 p_2}{(p_1 + p_2)^2} = \frac{(p_1 + p_2)^2}{(p_1 + p_2)^2} = 1. \quad (11.13)$$

Задача 1. Вычислить ток вероятности для этой задачи: а) когда $x < 0$; б) когда $x > 0$. Показать, что в обоих случаях он одинаков, и, таким образом, доказать, что вероятность сохраняется. Показать, что ток равен $S = v_t \rho$, где v_t — скорость прошедших частиц, ρ — плотность вероятности для этой волны.

Задача 2. Показать, что непрерывность функции ψ и ее производной предполагает постоянство тока вероятности в точке $x = 0$.

Заметим, что отражательная способность стремится к нулю, когда p_2 стремится к p_1 , и что она стремится к единице, когда p_2 стремится к нулю. Так как

$$p_2 = \sqrt{2m(E - V)},$$

то коэффициент отражения становится большим, лишь когда потенциал V сравним по величине с E . И все же некоторое отражение существует, как бы ни мал был скачок потенциала V .

Следует еще раз подчеркнуть, что свойство отражения от резких скачков потенциала является чисто квантовомеханическим эффектом. Оно вытекает из волновых свойств материи и не может быть получено в классической теории. Позже при изучении приближения ВКБ (гл. 12) мы увидим, что при нерезком изменении потенциала (в пределах длины волны электрона) отражения практически не происходит. Классические результаты будут поэтому справедливы лишь при медленном изменении потенциала. Как только потенциал начинает заметно изменяться на расстояниях, сравнимых с длиной волны электрона $\lambda = h/p$, волновые свойства материи начинают заметно проявляться, и одним из них является свойство отражения от потенциального барьера, величина которого недостаточно велика, чтобы полностью остановить частицу и повернуть ее обратно.

Случай Б ($E < V$).

Все электроны с энергией $E < V$, движущиеся слева от барьера, согласно классической физике, будут отражаться в точке $x = 0$, ни один из них не проникнет в область положительных x . Выясним теперь, как решает эту задачу квантовая теория.

Для ответа на этот вопрос исследуем характер решений волнового уравнения, когда $E < V$. В этой области волновое уравнение имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (V - E)\psi = 0,$$

и решением будет

$$\psi = A \exp\left(\sqrt{2m(V - E)} \frac{x}{\hbar}\right) + B \exp\left(-\sqrt{2m(V - E)} \frac{x}{\hbar}\right). \quad (11.14a)$$

Заметим, что решения являются вещественными, а не комплексными экспонентами. Для того чтобы вероятность оставалась конечной при $x \rightarrow \infty$, необходимо выбрать только решение с отрицательным показателем, т. е. выбрать $A = 0$.

При $x < 0$ мы сделаем то же, что и раньше, и запишем наиболее общее решение в виде

$$\psi = C \exp\left(i \sqrt{2mE} \frac{x}{\hbar}\right) + D \exp\left(-i \sqrt{2mE} \frac{x}{\hbar}\right). \quad (11.146)$$

Если ψ должна быть непрерывной при $x = 0$, то

$$C + D = B.$$

Если производная от ψ должна быть непрерывной в точке $x = 0$, то легко показать, что

$$\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} (C - D) = -\frac{B}{\hbar} \sqrt{2m(V - E)}, \quad (11.15)$$

или

$$C - D = iB \sqrt{\frac{V - E}{E}}.$$

Отсюда мы получаем

$$C = \frac{B}{2} \left(1 + i \sqrt{\frac{V - E}{E}}\right), \quad (11.16)$$

$$D = \frac{B}{2} \left(1 - i \sqrt{\frac{V - E}{E}}\right). \quad (11.17)$$

Отношение интенсивности отраженной волны к интенсивности падающей равно

$$R = \frac{|D|^2}{|C|^2} = 1. \quad (11.18)$$

Интересно также подсчитать фазу волн. Для этого обозначим $\sqrt{(V - E)/E} = \operatorname{tg} \varphi$. Тогда имеем

$$C = \frac{B}{2} (1 + i \operatorname{tg} \varphi) = \frac{B}{2 \cos \varphi} (\cos \varphi + i \sin \varphi) = \frac{B}{2 \cos \varphi} e^{i\varphi}, \quad (11.19)$$

$$D = \frac{B}{2} (1 - i \operatorname{tg} \varphi) = \frac{B}{2 \cos \varphi} (\cos \varphi - i \sin \varphi) = \frac{B}{2 \cos \varphi} e^{-i\varphi}. \quad (11.20)$$

Написав

$$\frac{B}{2 \cos \varphi} = \frac{I}{2} = \text{новой постоянной},$$

мы получим для волновой функции при $x < 0$

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{I}{2} \left[\exp\left(i \sqrt{2mE} \frac{x}{\hbar} + i\varphi\right) + \exp\left(-i \sqrt{2mE} \frac{x}{\hbar} - i\varphi\right) \right] = \\ &= I \cos\left(\sqrt{2mE} \frac{x}{\hbar} + \varphi\right). \end{aligned} \quad (11.21)$$

В типичном случае волновая функция выглядит более или менее так, как это показано на рис. 36.

Из уравнения (11.18) видно, что волна полностью отражается, так как интенсивность отраженной волны равна интенсивности падающей. Поскольку волновое уравнение предполагает сохранение вероятности, то ни один электрон не проходит за барьер вправо.

Задача 3. Доказать, что ток вероятности равен нулю для случая Б, т. е. при $E < V$.

Последний результат соответствует классическим предсказаниям для этого случая. Все же здесь есть отсутствующая в классической теории новая черта — проникновение экспоненциально спадающего слагаемого волновой функции в область $x > 0$. Это предполагает, что электрон может быть найден и в области пространства, где $V > E$, в то время как классически он никогда не может войти в эту область, так как он не имеет для этого достаточной энергии.

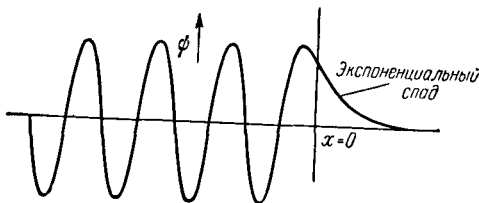


Рис. 36.

Для уяснения этого явления нужно вспомнить, что материя не идентична с классической корпускулярной моделью и что электрон обладает также волновыми свойствами, которые могут быть столь же важны, как и корпускулярные (см. гл. 6, п. 11). Область, где $V > E$, соответствует мнимому показателю преломления

$$n^2 = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) (E - V) \frac{C^2}{\omega^2}.$$

Мы уже знаем один случай в оптике, где имеет место мнимое значение n , а именно случай полного внутреннего отражения света. В рассматриваемом случае имеет место точно такой же тип экспоненциального проникновения волны из более плотной среды в менее плотную (см. [21], стр. 497 или стр. 438 перевода). Новое свойство проникновения в классически недоступную область должно поэтому рассматриваться с помощью волновой модели. Это действительно такой эффект, для которого корпускулярная модель совсем не дает объяснения.

Предположим, что мы установили прибор в классически недоступной области, позволяющий измерить положение электрона, например микроскоп. Нет ли здесь противоречия с законом сохранения энергии, так как имеется область, где частицы обладают отрицательной кинетической энергией? В действительности для постановки

такого эксперимента, доказывающего определенно нахождение электрона в этой области, необходимо освещение с такой энергией, что электрону будет сообщена положительная кинетическая энергия и не возникнет никаких противоречий из-за присутствия его в этой области. Для доказательства этого заметим, что любое наблюдение, которое гарантирует нахождение электрона в области, где $V > E$, должно привести электрон в такое состояние, для которого волновая функция представляется волновым пакетом, практически целиком находящимся в области, где $V > E$. Но для образования волнового пакета необходимы осциллирующие волновые функции, которые, интерферируя, взаимно гасятся вдали от центра пакета. Решения волнового уравнения для $V > E$ являются вещественными экспоненциальными функциями в области, где $x > 0$, т. е. они не являются осциллирующими функциями и не позволяют образовать волновой пакет. Осциллирующими волновыми функциями являются только те, для которых $E > V$. Следовательно, если только электрон находится в состоянии, позволяющем ему быть в области $x > 0$, ему нужно сообщить столь большую энергию, чтобы он мог проникнуть в эту область и с классической точки зрения.

Проникновение электрона в область, где $V > E$, кажется парадоксальным лишь в том случае, если пытаться удержаться на той точке зрения, что материя состоит из классических частиц. Однако вследствие существования волновых свойств материи электрон с определенной энергией есть нечто отличное от его классического истолкования. В действительности электрон может иметь определенную энергию, только когда его волновая функция является собственной функцией оператора Гамильтона, т. е. только когда электрон размазан по широкой области пространства. Кинетическая энергия электрона является как раз таким свойством, что она должна становиться положительной, когда электрон локализован в определенной области. Утверждение, что частицы проникают в области отрицательной кинетической энергии, таким образом, не имеет смысла, так как электрон не может быть локализован, т. е. мы не можем приписывать ему корпускулярные свойства, когда он находится в области, приводящей классически к отрицательной кинетической энергии. Говорить о частицах с отрицательной кинетической энергией столь же неверно, как и говорить о взаимодействии частиц в опыте Дэвиссона—Джермера. Вместо этого мы должны сказать, что оба эти эффекта являются результатом таких обстоятельств, для которых волновые свойства материи основные. Действительно, с точки зрения, изложенной в гл. 6, пп. 4—9, процесс измерения положения, буквально говоря, превращает электрон из волнового объекта в корпускулярный. Иными словами, взаимодействие с потенциальным полем, для которого $V > E$, приводит к более полной реализации потенциальных волновых свойств электрона, в то время как взаимодействие с прибором, измеряющим

положение, приводит к более полной реализации его потенциальных корпускулярных свойств.

5. Проникновение через барьер. Интересно выяснить вопрос, встречаются ли случаи, когда проникновение частиц в классически непроницаемую область приводит к физически важным результатам. На это можно ответить, что если область, где $V > E$, имеет конечную ширину, то частицы могут «проникать» сквозь потенциальный барьер, который так высок, что они никогда бы не могли пройти через него с классической точки зрения. Предположим, например, что потенциал имеет вид, изображенный на рис. 37.

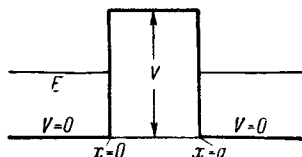


Рис. 37.

В интервале от $x = 0$ до $x = a$ $V > E$. Согласно классической теории, поток частиц, идущих слева, будет полностью отражен. Однако вследствие волновой природы материи есть некоторая вероятность, что частицы пройдут через барьер и, как мы покажем, они действительно могут попасть в область $x > a$, где $E > V$.

Решение этой задачи начнем с рассмотрения области справа от барьера, где $x > a$. Частиц, приходящих справа, нет, но есть частицы, идущие со стороны барьера вправо. Волновая функция в этой области поэтому должна иметь вид

$$\psi = A \exp\left(\frac{ip_1 x}{\hbar}\right), \quad (11.22)$$

где $p_1 = \sqrt{2mE}$. Внутри барьера наиболее общим является решение

$$\psi = B \exp\left(\frac{p_2 x}{\hbar}\right) + C \exp\left(-\frac{p_2 x}{\hbar}\right), \quad (11.23)$$

где $p_2 = \sqrt{2m(V-E)}$. Заметим, что теперь нет надобности отбрасывать экспоненциально возрастающее решение, так как область, где $V > E$, имеет конечные размеры. Для непрерывности ψ и $d\psi/dx$ в точке $x = a$ необходимо, чтобы

$$B \exp\left(\frac{p_2 a}{\hbar}\right) + C \exp\left(-\frac{p_2 a}{\hbar}\right) = A \exp\left(\frac{ip_1 a}{\hbar}\right), \quad (11.24)$$

$$B \exp\left(\frac{p_2 a}{\hbar}\right) - C \exp\left(-\frac{p_2 a}{\hbar}\right) = \frac{A i p_1}{p_2} \exp\left(\frac{ip_1 a}{\hbar}\right). \quad (11.25)$$

Разрешая эти уравнения относительно B и C , получаем

$$B = \frac{A}{2} \left(1 + \frac{ip_1}{p_2}\right) \exp\left[(ip_1 - p_2) \frac{a}{\hbar}\right], \quad (11.26)$$

$$C = \frac{A}{2} \left(1 - \frac{ip_1}{p_2}\right) \exp\left[(ip_1 + p_2) \frac{a}{\hbar}\right]. \quad (11.27)$$

Рассмотрим случай, когда $p_2 a / \hbar \gg 1$, иными словами, предположим,

что показатели экспонент сильно изменяются от одной границы барьера к другой. Заметим, что тогда $|C| \gg |B|$. На границе барьера, где $x=0$, главным членом волновой функции является член, содержащий $C \exp(-p_2 x/\hbar)$.

Когда $x < 0$, волновая функция имеет вид

$$\psi = D \exp\left(\frac{ip_1 x}{\hbar}\right) + E \exp\left(-\frac{ip_1 x}{\hbar}\right).$$

Для непрерывности ψ и $d\psi/dx$ в точке $x=0$ необходимо, чтобы

$$D + E = C + B, \quad (11.28)$$

$$D - E = \frac{ip_2}{p_1} (C - B), \quad (11.29)$$

$$D = \frac{C}{2} \left(1 + \frac{ip_2}{p_1}\right) + \frac{B}{2} \left(1 - \frac{ip_2}{p_1}\right), \quad (11.30)$$

$$E = \frac{C}{2} \left(1 - \frac{ip_2}{p_1}\right) + \frac{B}{2} \left(1 + \frac{ip_2}{p_1}\right). \quad (11.31)$$

Если барьер широкий, то можно в первом приближении пренебречь B . Тогда получим

$$D = \frac{A}{4} \left(1 + \frac{ip_2}{p_1}\right) \left(1 - \frac{ip_1}{p_2}\right) \exp\left(\frac{ip_1 a}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{p_2 a}{\hbar}\right), \quad (11.32)$$

$$E = \frac{A}{4} \left(1 - \frac{ip_2}{p_1}\right) \left(1 - \frac{ip_1}{p_2}\right) \exp\left(\frac{ip_1 a}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{p_2 a}{\hbar}\right). \quad (11.33)$$

Интересно найти отношение интенсивности прошедшей волны к интенсивности падающей, т. е. коэффициент прозрачности T :

$$T = \frac{|A|^2}{|D|^2} = \frac{16 \exp(-2p_2 a/\hbar)}{[1 + (p_2/p_1)^2][1 + (p_1/p_2)^2]}. \quad (11.34)$$

Полученный результат показывает, что существует малая вероятность проникновения частицы через потенциальный барьер, который она никак не может преодолеть, согласно классической теории. Вероятность быстро убывает с увеличением ширины барьера, а также с ростом его высоты.

Как указано в п. 4, свойство проникновения через барьер полностью обязано своим существованием волновым свойствам материи и совершенно подобно полному внутреннему отражению световых волн. Если две стеклянные пластинки помещены близко одна к другой, но не касаются друг друга, то свет будет проходить от первой пластинки ко второй, даже если угол падения больше критического. Интенсивность прошедшей волны, однако, убывает экспоненциально с толщиной слоя воздуха. Здесь причина пропускания света точно та же, что и в случае волн электронов, а именно экспоненциальное

проникновение световых волн в область мнимого показателя преломления.

Общий характер волновой функции представлен схематически на рис. 38. Большая часть падающей волны отражается, но малая доля проходит через барьер в область с $x > a$.

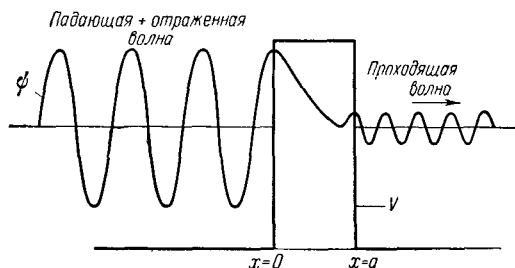


Рис. 38.

Для вычисления коэффициента отражения необходимо использовать точное решение, не пренебрегая коэффициентом B . Коэффициент отражения равен

$$R = \frac{|E|^2}{|D|^2}. \quad (11.35)$$

Задача 4. Доказать (с помощью точного решения), что $T + R = 1$. Вычислить ток вероятности внутри барьера и показать, что он равен току прошедшей волны. Отсюда проверить сохранение вероятности для этого случая. (Заметим, что ток в этом случае вызывается эффектами интерференции экспоненциально возрастающих и экспоненциально убывающих решений. Поэтому в этой области нельзя пренебрегать меньшим членом решения, если вычисляется ток.)

6. Применения задачи о проникновении частиц через потенциальный барьер. Важным примером задачи о проникновении микрочастиц через потенциальный барьер является α -распад ядра. Известно, что некоторые ядра способны испускать α -частицы, но среднее время для испускания таких частиц в различных радиоактивных ядрах меняется в очень широких пределах. Теория α -распада основывается на представлении, что α -частицы удерживаются внутри ядра громадными силами притяжения, подобными силам, которые обуславливают притяжение нейтронов к протонам. Однако эти силы имеют очень короткий радиус действия, поэтому ими можно совершенно пренебречь, пока α -частицы находятся вне ядра. Так как α -частица и ядро заряжены положительно, то электрические силы стремятся оттолкнуть их друг от друга. Когда α -частицы находятся внутри ядра, электрическое отталкивание много меньше внутриядерных сил притяжения, но вне ядра действует только оно. Поэтому при приближении α -частицы к ядру с большого расстояния на нее действует

прежде всего электрическая сила отталкивания и появляется потенциальная энергия $2Ze^2/r$, где Ze — заряд ядра и $2e$ — заряд α -частицы. Когда она достигает ядра, это отталкивание быстро уравнивается ядерным притяжением. Потенциальная кривая как функция расстояния r α -частицы от центра ядра схематически изображена на рис. 39. Если энергия α -частицы недостаточна для проникновения через отталкивающий кулоновский потенциальный барьер, то,

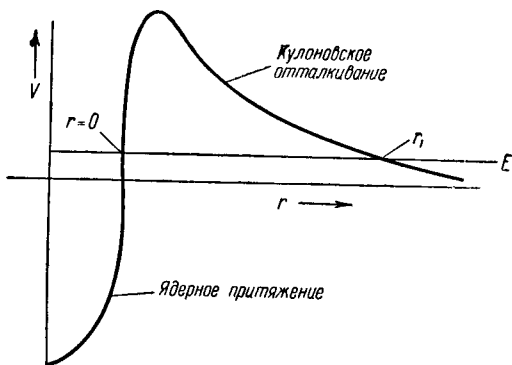


Рис. 39.

согласно классической физике, α -частица, раз попав в ядро, будет в нем заперта. Но благодаря своим волновым свойствам α -частица имеет некоторую малую вероятность просочиться сквозь потенциальный барьер.

Для нахождения среднего значения скорости испускания предположим, что α -частицы движутся по всем направлениям внутри ядра более или менее свободно. Известно, что это движение происходит со скоростью порядка 10^9 см/сек ([26], стр. 110). Поскольку тяжелые радиоактивные ядра, такие, как ядра урана, имеют радиус порядка 10^{-12} см, то α -частица ударяет о барьер около 10^{21} раз в секунду. Каждый раз, когда она ударяется о барьер, вероятность ее проникновения через него равна коэффициенту прозрачности T барьера, определяемому выражением (11.34). Отсюда, вероятность ее вылета из ядра за 1 сек равна

$$P = 10^{21} T \text{ сек}^{-1}.$$

Среднее время жизни ядра обратно пропорционально этой величине

$$\tau = \frac{10^{-21}}{T} \text{ сек}.$$

Для вычисления коэффициента прозрачности T барьера нужно знать величины $E - V$ и a — ширину барьера. В действительности барьер

далек от прямоугольного, как видно из рис. 33, поэтому вышеприведенное решение не очень подходит для данного случая. Более точное решение будет приведено ниже с использованием приближения ВКБ. Здесь мы просто попытаемся оценить порядок величины коэффициента прозрачности T . Для ядра урана величина $V - E$ будет порядка 12 Мэв [26], а средняя величина ширины барьера — около $3 \cdot 10^{-12} \text{ см}$.

Множитель $[1 + (p_2/p_1)^2][1 + (p_1/p_2)^2]$ в (11.34) так близок к единице, что мы можем им пренебречь по сравнению с экспоненциальной функцией. Для α -частицы $m = 6,4 \cdot 10^{-24} \text{ г}$. Замечая, что $1 \text{ эв} = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}$, получим

$$2 \sqrt{2m(V-E)} \frac{a}{\hbar} = \frac{2 \sqrt{12,8 \cdot 10^{-24} \cdot 12 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12} \cdot 10^6}}{1,07 \cdot 10^{-27}} 3 \cdot 10^{-12} \cong 90.$$

В результате будем иметь

$$P = 10^{21} e^{-90} = 10^{-18} \text{ сек}^{-1} = 10^{-11} \text{ год}^{-1}.$$

Ясно, что это число сильно зависит от точных значений $V - E$ и a , так как они входят в показатель экспоненты. В итоге мы получим лишь грубую оценку искомой величины. Можно также видеть, что время жизни для ядер различных элементов изменяется в широких пределах, так как величины $V - E$ и a меняются, а экспоненциальная функция весьма чувствительна к их значениям. В гл. 12 с помощью приближения ВКБ будет дано решение, которое точнее согласуется с опытом и дает лучшее представление об изменении времени жизни для ядер различных элементов.

7. Прямоугольная потенциальная яма. Рассмотрим теперь прямоугольный потенциал для случая притяжения, а не отталкивания (рис. 40). Пусть потенциал будет равен $-V_0$ в области от $x = a$ до $x = -a$ и нулю во всех остальных точках. Далее, положим, что поток электронов направлен слева направо. Согласно классической физике, ни один электрон (если $E > 0$) не повернет обратно от ямы, но, как мы уже видели, волновая теория приводит к тому, что электроны будут отражаться от мест с резким изменением потенциала в точках $x = a$ и $x = -a$. В результате будут существовать отраженная и прошедшая волны, так же как и падающая *).

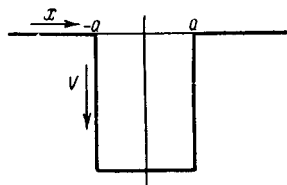


Рис. 40.

*) Заметим, что это справедливо также и в случае потенциального барьера, когда $E > V_0$, т. е. в случае, когда кинетическая энергия внутри барьера остается положительной.

Для решения этой задачи рассмотрим сначала область с $x > a$, где существует только прошедшая волна. Поэтому волновая функция имеет вид

$$\psi = A \exp\left(\frac{ip_1 x}{\hbar}\right), \quad (11.36)$$

где p_1 — импульс в этой области $p_1 = \sqrt{2mE}$.

В области ямы, от $x = -a$ до $x = +a$, волновая функция имеет вид

$$\psi = B \exp\left(\frac{ip_2 x}{\hbar}\right) + C \exp\left(-\frac{ip_2 x}{\hbar}\right), \quad (11.37)$$

где $p_2 = \sqrt{2m(E + V_0)}$.

Для выражения значений B и C через A необходима непрерывность ψ и $d\psi/dx$ в точке $x = a$:

$$A \exp\left(\frac{ip_1 a}{\hbar}\right) = B \exp\left(\frac{ip_2 a}{\hbar}\right) + C \exp\left(-\frac{ip_2 a}{\hbar}\right), \quad (11.38)$$

$$\frac{p_1}{p_2} A \exp\left(\frac{ip_1 a}{\hbar}\right) = B \exp\left(\frac{ip_2 a}{\hbar}\right) - C \exp\left(-\frac{ip_2 a}{\hbar}\right). \quad (11.39)$$

Решение этих уравнений дает

$$B = \frac{A}{2} \left(1 + \frac{p_1}{p_2}\right) \exp\left[\frac{i(p_1 - p_2)a}{\hbar}\right], \quad (11.40)$$

$$C = \frac{A}{2} \left(1 - \frac{p_1}{p_2}\right) \exp\left[\frac{i(p_1 + p_2)a}{\hbar}\right]. \quad (11.41)$$

В области $x < -a$ волновая функция имеет вид

$$\psi = D \exp\left(\frac{ip_1 x}{\hbar}\right) + E \exp\left(-\frac{ip_1 x}{\hbar}\right). \quad (11.42)$$

Чтобы ψ и $d\psi/dx$ были непрерывны в точке $x = -a$, нужно потребовать

$$D \exp\left(-\frac{ip_1 a}{\hbar}\right) + E \exp\left(\frac{ip_1 a}{\hbar}\right) = B \exp\left(-\frac{ip_2 a}{\hbar}\right) + C \exp\left(\frac{ip_2 a}{\hbar}\right), \quad (11.43)$$

$$\begin{aligned} D \exp\left(-\frac{ip_1 a}{\hbar}\right) - E \exp\left(\frac{ip_1 a}{\hbar}\right) &= \\ &= \left(\frac{p_2}{p_1}\right) \left[B \exp\left(-\frac{ip_2 a}{\hbar}\right) - C \exp\left(\frac{ip_2 a}{\hbar}\right)\right], \end{aligned} \quad (11.44)$$

$$D = \frac{B}{2} \left(1 + \frac{p_2}{p_1}\right) \exp\left[\frac{i(p_1 - p_2)a}{\hbar}\right] + \left(\frac{C}{2}\right) \left(1 - \frac{p_2}{p_1}\right) \exp\left[\frac{i(p_1 + p_2)a}{\hbar}\right], \quad (11.45)$$

$$E = \frac{B}{2} \left(1 - \frac{p_2}{p_1} \right) \exp \left[\frac{-i(p_1 + p_2)a}{\hbar} \right] + \left(\frac{C}{2} \right) \left(1 + \frac{p_2}{p_1} \right) \exp \left[\frac{i(p_2 - p_1)a}{\hbar} \right], \quad (11.46)$$

$$D = \left(\frac{A}{4} \right) \exp \left(\frac{2ip_1a}{\hbar} \right) \left[\left(1 + \frac{p_2}{p_1} \right) \left(1 + \frac{p_1}{p_2} \right) \exp \left(-\frac{2ip_2a}{\hbar} \right) + \left(1 - \frac{p_2}{p_1} \right) \left(1 - \frac{p_1}{p_2} \right) \exp \left(\frac{2ip_2a}{\hbar} \right) \right], \quad (11.47)$$

$$E = \left(\frac{A}{4} \right) \left[\left(1 - \frac{p_2}{p_1} \right) \left(1 + \frac{p_1}{p_2} \right) \exp \left(-\frac{2ip_2a}{\hbar} \right) + \left(1 + \frac{p_2}{p_1} \right) \left(1 - \frac{p_1}{p_2} \right) \exp \left(\frac{2ip_2a}{\hbar} \right) \right]. \quad (11.48)$$

Коэффициент прозрачности при этом равен

$$T = \frac{|A|^2}{|D|^2} = \left[\cos \left(\frac{2p_2a}{\hbar} \right) + \frac{i}{2} \left(\frac{p_1}{p_2} + \frac{p_2}{p_1} \right) \sin \left(\frac{2p_2a}{\hbar} \right) \right]^{-2} = \left[\cos^2 \left(\frac{2p_2a}{\hbar} \right) + \frac{1}{4} \left(\frac{p_1}{p_2} + \frac{p_2}{p_1} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{2p_2a}{\hbar} \right) \right]^{-1}. \quad (11.49)$$

Замечая, что

$$\cos^2(\quad) = 1 - \sin^2(\quad) \quad \text{и} \quad \left(\frac{p_1}{p_2} + \frac{p_2}{p_1} \right)^2 - 4 = \left(\frac{p_1}{p_2} - \frac{p_2}{p_1} \right)^2,$$

получаем

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(p_1/p_2 - p_2/p_1 \right)^2 \sin^2(2p_2a/\hbar)}. \quad (11.50)$$

Этот результат очень интересен. Во-первых, мы видим, что при $p_2 = p_1$ $T = 1$. Это естественно, так как в таком случае потенциальной ямы вообще нет. Если $p_1 \neq p_2$, то коэффициент прозрачности, вообще говоря, меньше единицы, что указывает на некоторое отражение. Это отражение от притягивающего потенциала есть результат волновой природы материи, оно напоминает отражение звуковой волны от открытого конца органной трубки. Однако есть один случай, когда $T = 1$, даже если $p_1 \neq p_2$, а именно, когда $\sin^2(2p_2a/\hbar) = 0$ или $p_2 = N\pi\hbar/2a$, где N — целое число.

Как следует понимать этот результат? Для выяснения его значения заметим, что эта задача подобна оптической задаче об интерферометре Фабри — Перо ([27], стр. 93 или [85*], стр. 79). В нашей задаче волна отражается от резких изменений потенциала, которые соответствуют граням пластинки стекла в оптике, где также имеет место резкий скачок показателя преломления. Эта задача напоминает задачу о двух стеклянных пластинках, отстоящих на расстоянии $2a$. При рассмотрении задачи об интерферометре Фабри —

Перо было показано, что если волна, которая отражается от поверхности в точке $x=a$, возвращается обратно на поверхность после ее отражения в точке $x=-a$ с изменением фазы на $2\pi N$, то происходит усиление прошедшей волны вследствие интерференции со следующей приходящей волной. Таким образом, для определенных длин волн коэффициент прозрачности равен единице. Примерная зависимость коэффициента прозрачности от волнового числа

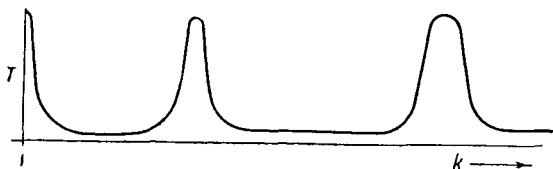


Рис. 41.

показана на рис. 41. Острота и ширина пиков зависят от коэффициента отражения, а в нашей задаче от отношения p_1/p_2 .

Задача 5. Вычислить отражательную способность $R = |E|^2/|D|^2$ и показать, что $T + R = 1$.

8. Ширина пика в резонансных максимумах прозрачности. Для вычисления ширины максимумов коэффициента T прежде всего положим, что отношение p_2/p_1 велико, так что пик на кривой T будет острым. Тогда возникает вопрос, как далеко от точек $p_2 = N\pi\hbar/2a$ величина коэффициента T уменьшится вдвое. Это случится, когда

$$\frac{1}{4} \left(\frac{p_1}{p_2} - \frac{p_2}{p_1} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{2p_2 a}{\hbar} \right) = 1, \quad (11.51)$$

или

$$\sin \left(\frac{2p_2 a}{\hbar} \right) = \pm \frac{2}{|p_1/p_2 - p_2/p_1|}. \quad (11.52)$$

Если знаменатель в правой части (11.52) велик, то $2p_2 a/\hbar$ мало отличается от $N\pi$ в этой точке и можно написать

$$\frac{2p_2 a}{\hbar} \cong N\pi \pm \frac{2}{|p_1/p_2 - p_2/p_1|}, \quad (11.53)$$

$$p_2 \cong \frac{N\pi\hbar}{2a} \pm \frac{\hbar/a}{|p_1/p_2 - p_2/p_1|}, \quad (11.54)$$

$$\delta p_2 \cong \frac{\hbar}{a} \frac{1}{|p_1/p_2 - p_2/p_1|}. \quad (11.55a)$$

Подставляя $p_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}$, мы получим при дифференцировании (считая величину $\delta p_2/p_2$ малой)

$$\delta p_2 \cong \sqrt{\frac{m}{2(E - V_0)}} \delta E \quad (11.556)$$

и

$$\begin{aligned} \delta E \cong \sqrt{\frac{2(E - V_0)}{m}} \delta p_2 \cong \sqrt{\frac{2(E - V_0)}{m}} \frac{\hbar}{a} \frac{1}{|p_1/p_2 - p_2/p_1|} = \\ = \frac{v_2 \hbar / a}{|p_1/p_2 - p_2/p_1|}, \quad (11.56) \end{aligned}$$

где v_2 — скорость частицы внутри потенциальной ямы.

Легко объяснить ширину резонансных максимумов T как результат многократных отражений волны от краев потенциальной ямы. Если T — коэффициент прозрачности, то волна, падающая на резкий скачок потенциала в точке $x = a$, будет отражаться примерно $1/T$ раз, прежде чем большая часть ее будет пропущена. Согласно равенству (11.11), коэффициент прозрачности равен

$$T = \frac{4p_2 p_1}{(p_1 + p_2)^2},$$

где p_1 — импульс прошедшей частицы, а p_2 — падающей частицы.

Смещение фазы, претерпеваемое волной, когда она проходит потенциальную яму и возвращается обратно, равно $4p_2 a / \hbar$ и равно $2N\pi$ для случая полного резонанса. Полное смещение фазы после $1/T$ отражений будет $\varphi = 4p_2 a / T\hbar$, а для полного резонанса $\varphi_R = 2N\pi / T$. Усиливающая интерференция будет исчезать, когда $\varphi - \varphi_R \cong 1$ или когда

$$\varphi - \varphi_R = \frac{4\Delta p_2 a}{T\hbar} \cong 1$$

и

$$\Delta p_2 \cong \frac{\hbar T}{4a} \cong \frac{p_1 p_2}{(p_1 + p_2)^2} \frac{\hbar}{a}.$$

Для острого резонанса необходимо, чтобы T было мало и могло произойти много отражений. Это случится только, когда $p_1 \ll p_2$, в результате $(p_1 + p_2)^2 \cong p_2^2$, и мы получаем $\Delta p_2 \cong \frac{p_1}{p_2} \frac{\hbar}{a}$. Тот же результат мы получили в равенстве (11.55а), пользуясь тем же приближением $p_1 \ll p_2$. Заметим, что весь этот вывод весьма приближенный и качественный.

9. Эффект Рамзауера. Интересный пример таких «резонансов» прозрачности получается при рассеивании электронов атомами

благородных газов, таких, как неон и аргон. Потенциальная энергия электрона внутри такого атома схематически показана на рис. 42. В первом приближении она может быть представлена как прямоугольная яма шириной порядка $2 \cdot 10^{-8}$ см и с постоянной глубиной V_0 . Для очень медленных электронов, кинетическая энергия которых порядка 0,1 эв, эффективная глубина и ширина ямы таковы,

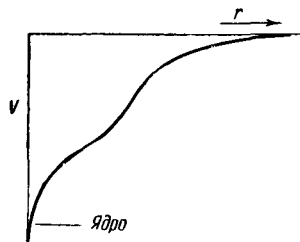


Рис. 42.

что наблюдается резонанс прозрачности. Таким образом, атом кажется практически прозрачным для электронов с такой скоростью. Поэтому у таких атомов, например, вероятность рассеяния будет значительно меньше, чем для атомов, у которых такой резонанс отсутствует, или для этих же атомов, но при более высоких энергиях электронов, когда резонанс также не существует. Этот эффект впервые экспериментально наблюдался Рамзауером и впоследствии был объяснен с помощью

квантовой теории. Мы будем изучать этот эффект более подробно в теории рассеяния, где будут приняты во внимание осложнения, связанные с трехмерностью реальной задачи (см. гл. 21, п. 51, а также [28], стр. 133 или стр. 242 перевода).

Задача 6. Какова должна быть глубина ямы, чтобы возникли резонансные явления при рассеянии электронов с кинетической энергией в 0,1 эв, если принять ширину потенциальной ямы равной $2 \cdot 10^{-8}$ см?

10. Связанные состояния. Согласно классической теории, частица, для которой $E < 0$, должна быть заперта внутри потенциальной ямы, так как энергия ее недостаточна, чтобы выбраться из ямы. Появляются ли какие-нибудь связанные состояния и при квантовой трактовке этой задачи? Покажем, что могут быть такие связанные состояния. В общем случае, однако, возможные энергии этих связанных состояний не непрерывны, как в классической теории, а дискретны. Это противоречит также и квантовым результатам для положительных энергий, где, как мы видели, не накладывается никаких ограничений на величину E , для которых существуют решения волнового уравнения, так что в этом случае получается непрерывный энергетический спектр.

Начнем решение для собственных функций связанного состояния и соответствующих им собственных значений. В области, где $x > a$, решение является линейной комбинацией вещественных экспоненциальных функций, поэтому, чтобы иметь конечное значение функции ψ при $x \rightarrow \infty$, нужно выбрать экспоненциальные функции, которые убывают с возрастанием x . Следовательно, $\psi = A \exp \times$

$\times (-p_1 x/\hbar)$, где $p = \sqrt{2m|E|}$ и E — отрицательная энергия связанного состояния *). Внутри прямоугольной потенциальной ямы волновая функция имеет вид (см. рис. 40)

$$\psi = B \exp\left(\frac{ip_2 x}{\hbar}\right) + C \exp\left(-\frac{ip_2 x}{\hbar}\right), \quad (11.57a)$$

где $p_2 = \sqrt{2m(V_0 - |E|)}$. Условия непрерывности (в точке $x = a$) приводят к уравнениям

$$\begin{aligned} B \exp\left(\frac{ip_2 a}{\hbar}\right) + C \exp\left(-\frac{ip_2 a}{\hbar}\right) &= A \exp\left(-\frac{p_1 a}{\hbar}\right), \\ B \exp\left(\frac{ip_2 a}{\hbar}\right) - C \exp\left(-\frac{ip_2 a}{\hbar}\right) &= \frac{i A p_1}{p_2} \exp\left(-\frac{p_1 a}{\hbar}\right). \end{aligned}$$

Решая их относительно B и C , получаем

$$\left. \begin{aligned} B &= \frac{A}{2} \left(1 + \frac{ip_1}{p_2}\right) \exp\left[-\frac{a}{\hbar}(p_1 + ip_2)\right], \\ C &= \frac{A}{2} \left(1 - \frac{ip_1}{p_2}\right) \exp\left[-\frac{a}{\hbar}(p_1 - ip_2)\right]. \end{aligned} \right\} \quad (11.57b)$$

Далее необходимо, чтобы в точке $x = -a$ решение непрерывно смыкалось с экспоненциальной функцией, которая убывает при $x \rightarrow -\infty$. Это не будет в общем случае, если соответствующая энергия $|E|$ не имеет подходящую величину. Чтобы найти, когда такое решение возможно, мы напишем (для $x < -a$)

$$\psi = D \exp\left(\frac{p_1 x}{\hbar}\right). \quad (11.58)$$

Условиями непрерывности являются

$$D \exp\left(\frac{p_1 a}{\hbar}\right) = B \exp\left(-\frac{ip_2 a}{\hbar}\right) + C \exp\left(\frac{ip_2 a}{\hbar}\right), \quad (11.59)$$

$$\frac{p_1}{p_2} D \exp\left(\frac{p_1 a}{\hbar}\right) = i \left[B \exp\left(-\frac{ip_2 a}{\hbar}\right) - C \exp\left(\frac{ip_2 a}{\hbar}\right) \right]. \quad (11.60a)$$

Разделив второе из этих уравнений на первое, получим

$$\begin{aligned} -i \frac{p_1}{p_2} &= \frac{B \exp(-ip_2 a/\hbar) - C \exp(ip_2 a/\hbar)}{B \exp(-ip_2 a/\hbar) + C \exp(ip_2 a/\hbar)} = \\ &= \frac{[1 + (ip_1/p_2)] \exp(-2ip_2 a/\hbar) - [1 - (ip_1/p_2)] \exp(2ip_2 a/\hbar)}{[1 + (ip_1/p_2)] \exp(-2ip_2 a/\hbar) + [1 - (ip_1/p_2)] \exp(2ip_2 a/\hbar)}. \end{aligned} \quad (11.60b)$$

*) V_0 по определению — положительное число, как указывалось в связи с рис. 40.

Для упрощения последнего выражения введем обозначения

$$\frac{p_1}{p_2} = \operatorname{tg} \varphi, \quad 1 + \frac{ip_1}{p_2} = \frac{1}{\cos \varphi} (\cos \varphi + i \sin \varphi) = \frac{e^{i\varphi}}{\cos \varphi}.$$

Мы получим

$$\operatorname{tg} \varphi = i \frac{\exp [i(\varphi - 2p_2 a/\hbar)] - \exp [-i(\varphi - 2p_2 a/\hbar)]}{\exp [i(\varphi - 2p_2 a/\hbar)] + \exp [-i(\varphi - 2p_2 a/\hbar)]} = \operatorname{tg} \left(\frac{2p_2 a}{\hbar} - \varphi \right). \quad (11.61)$$

Вышеприведенное равенство предполагает, что $\varphi = 2p_2 a/\hbar - \varphi + N\pi$, где N — любое целое число (положительное или отрицательное). Решение для φ дает

$$\varphi = p_2 \frac{a}{\hbar} + \frac{N\pi}{2},$$

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{p_1}{p_2} = \operatorname{tg} \left(\frac{p_2 a}{\hbar} + \frac{N\pi}{2} \right) = \begin{cases} \operatorname{tg} \frac{p_2 a}{\hbar}, & N \text{ четное,} \\ -\operatorname{ctg} \frac{p_2 a}{\hbar}, & N \text{ нечетное.} \end{cases} \quad (11.62)$$

Выражая p_1 и p_2 через E и V_0 , получим

$$\sqrt{\frac{|E|}{V_0 - |E|}} = \begin{cases} \operatorname{tg} \left[\sqrt{2m(V_0 - |E|)} \frac{a}{\hbar} \right], & N \text{ четное,} \\ -\operatorname{ctg} \left[\sqrt{2m(V_0 - |E|)} \frac{a}{\hbar} \right], & N \text{ нечетное.} \end{cases} \quad (11.63)$$

Это трансцендентное уравнение определяет $|E|$. В тех случаях, когда решение существует, мы получаем возможный энергетический уровень. Уравнение, в общем случае, должно быть решено численно или графически. Однако можно получить некоторое приближенное представление о местоположении энергетических уровней. Для этого перепишем уравнения, произведя подстановку

$$\sqrt{2m(V_0 - |E|)} \frac{a}{\hbar} = \xi; \quad 2m|E| = 2mV_0 - \left(\frac{\hbar}{a} \right)^2 \xi^2. \quad (11.64)$$

Это дает

$$\frac{\hbar}{a} \frac{\xi}{\sqrt{2mV_0 - (\hbar/a)^2 \xi^2}} = \begin{cases} \operatorname{ctg} \xi, & N \text{ четное,} \\ -\operatorname{tg} \xi, & N \text{ нечетное,} \end{cases} \quad (11.65)$$

После того, как мы решим это уравнение относительно ξ , можно получить $|E|$ из уравнения (11.64).

Случай А (N нечетное).

Необходимо найти пересечение кривой $y_1 = \operatorname{tg} \xi$ с кривой

$$y_2 = -\frac{\hbar}{a} \xi \left[2mV_0 - \left(\frac{\hbar}{a} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}$$

(см. рис. 43). Заметим, что кривая для y_2 определена только для

$$\xi = \pm \sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar},$$

так как по определению $|E|$ — положительная величина, а большие величины ξ соответствуют отрицательным значениям $|E|$ в уравнении (11.64). Кривая для y_2 проходит через начало координат с наклоном, определяемым значениями V_0 и a , и, наконец, уходит в бесконечность при

$$\xi = \pm \sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar}.$$

Пересечение кривых y_1 и y_2 в точке $\xi = 0$ дает лишний корень, который не соответствует физически приемлемому решению уравнения Шрёдингера.

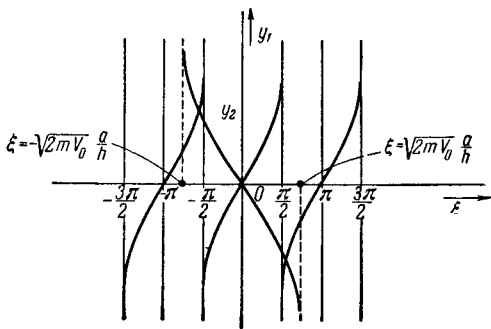


Рис. 43.

Задача 7. Доказать подстановкой уравнения (11.57а) в уравнение Шрёдингера, что корень $\xi = 0$ не приводит к правильному решению.

Если $\sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar} < \frac{\pi}{2}$, то нет других пересечений кривых y_1 и y_2 и поэтому нет решений для связанных состояний. Легко проверить, что условием существования N решений для связанных состояний является

$$\sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar} > \left(N + \frac{1}{2}\right)\pi,$$

или

$$V_0 > \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 \left(N + \frac{1}{2}\right)^2 \pi^2.$$

Заметим, что мы всегда получаем положительные и отрицательные корни парами. Но так как величина $|E|$ зависит только от ξ^2 (см. уравнение (11.64)), то каждая пара приводит только к одному значению $|E|$.

Случай Б (N — четное).

Подобная же трактовка может быть дана и для случая четного N . Строим кривую $y_1 = \operatorname{ctg} \xi$ и находим ее пересечение с кривой

$$y_2 = \frac{\hbar}{a} \frac{\xi}{\sqrt{2mV_0 - (\hbar/a)^2 \xi^2}}$$

(см. рис. 44),

Первое решение получается, когда $\xi < \frac{\pi}{2}$, следующее — когда $\xi > \pi$ и т. д. По крайней мере одно решение этого типа (N четное) может поэтому существовать, как бы ни был мал потенциал V_0 . Для существования двух решений необходимо, чтобы $\xi > \pi$ или

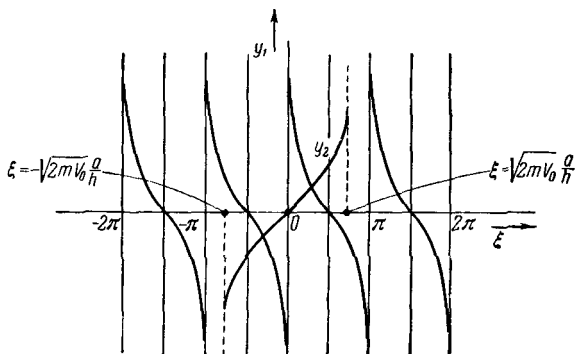


Рис. 44.

$V_0 > \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{a} \right)^2 \pi^2$. Чем больше V_0 , тем больше число возможных решений.

Задача 8. Предположим, что $V_0 = 20$ Мэв, $a = 2,8 \cdot 10^{-13}$ см. Найти энергетические уровни (численно или графически) для протона ($m = 1,6 \cdot 10^{-24}$ г) в такой потенциальной яме. Найти затем то же для α -частицы с массой $m = 6,4 \cdot 10^{-24}$ г.

11. Предельный случай бесконечно глубокой ямы. Если яма бесконечно глубока, то решение для классически непроницаемой области $\exp \left[-\sqrt{2m(V_0 - |E|)} \frac{x}{\hbar} \right]$ исчезает с бесконечной скоростью, так что волновая функция должна быть равна нулю на каждом из краев ямы. Решение тогда должно иметь вид $\psi = \sin \left(N \frac{\pi x}{2a} \right)$, где N — целое число *). Так как решение может также быть записано в виде

$$\psi = \sin \sqrt{2m(V_0 - |E|)} \frac{x}{\hbar},$$

то имеем

$$\sqrt{V_0 - |E|} = \frac{\hbar}{a} \left(\frac{N\pi}{2} \right) \frac{1}{\sqrt{2m}},$$

или

$$V_0 - |E| = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{a} \right)^2 \left(\frac{N\pi}{2} \right)^2.$$

*) Для удобства мы сместили начало координат к одной стороне ямы, это обозначение сохраняется только в данном пункте.

Можно легко проверить, что уравнение (11.63) приводит к тому же решению, так как при $V_0 \rightarrow \infty$ имеем $\frac{|E|}{V_0 - |E|} \rightarrow 0$. Отсюда

$$\left. \begin{aligned} N \text{ нечетное: } \operatorname{tg} \sqrt{2m(V_0 - |E|)} \frac{a}{\hbar} &\rightarrow 0; \\ N \text{ четное: } \operatorname{ctg} \sqrt{2m(V_0 - |E|)} \frac{a}{\hbar} &\rightarrow 0. \end{aligned} \right\}$$

Это приводит к

$$\sqrt{V_0 - |E|} = \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{a} \right) \frac{N\pi}{2},$$

что соответствует результатам, полученным непосредственно расчетом.

12. Графическая интерпретация решений. Можно дать простую графическую картину, которая позволяет легко понять общий характер всех этих различных видов решений. Рассмотрим волновое уравнение (11.2) для одномерного случая

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi = 0.$$

Это уравнение определяет вторую производную волновой функции ψ через ψ и $E - V$. Когда $E > V$ (положительная кинетическая энергия), вторая производная противоположна по знаку самой функции ψ . Поэтому ψ вогнута по отношению к оси x , так что волновая функция будет стремиться осциллировать. (Этот результат находится в согласии с точным решением

$$\psi = A \cos \sqrt{2m(E - V)} \frac{x}{\hbar} + B \sin \sqrt{2m(E - V)} \frac{x}{\hbar}.$$

Чем больше $E - V$, тем больше кривизна ψ и тем более быстро она осциллирует.)

Однако когда $V > E$, то $d^2\psi/dx^2$ имеет тот же знак, что и ψ , т. е. ψ обращена выпуклостью к оси x . Это означает, что если уж ψ возрастает, то она будет возрастать даже еще более быстро, так как наклон должен быть всегда возрастающим. (Это находится в согласии с точным решением

$$\psi = A \exp \left[-\sqrt{2m(V - E)} \frac{x}{\hbar} \right] + B \exp \left[\sqrt{2m(V - E)} \frac{x}{\hbar} \right].$$

Чем больше $V - E$, тем более быстро меняются экспоненциальные функции.)

Рассмотрим теперь связанные состояния в прямоугольной яме. Когда $x < -a$ (рис. 45), мы начинаем с экспоненциального решения, которое возрастает с возрастанием x и искривляется вверх. В точке $x = -a$ кинетическая энергия становится положительной, и так как ψ положительна, кривизна становится отрицательной.

Волновая функция тогда начинает искривляться обратно по направлению к $\psi=0$ со скоростью, зависящей от разности $V_0 - |E|$. Если $V_0 - |E|$ достаточно велика, то наклон будет отрицательным в момент достижения точки $x=a$. При $x > a$ функция ψ начинает снова загибаться вверх, так как отрицательна разность $V_0 - |E|$. При произвольном выборе $|E|$ она будет в конце концов возрастать без

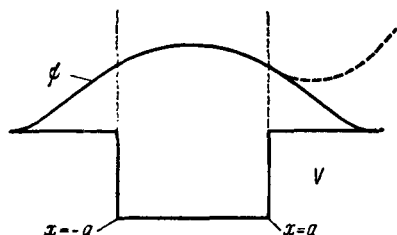


Рис. 45.

связей, и поэтому решение становится невозможным. Только в том случае, если $|E|$ таково, что наклон в $x=a$ соответствует требуемому наклону убывающей экспоненциальной функции

$$\left[\psi = \exp \left(-\frac{x}{\hbar} V \sqrt{2m|E|} \right) \right],$$

решение будет оставаться связанным при $x \rightarrow \infty$. Поэтому только

определенным значениям $|E|$ будут соответствовать связанные состояния. Эти значения $|E|$ и будут собственными значениями задачи.

Если потенциал V_0 очень велик, то ψ может переходить в спадающую экспоненциальную функцию при $x=a$ после одного или большего числа колебаний. Это будут добавочные связанные состояния. Такие возможности показаны на рис. 46. Чем больше V_0 , тем больше, в общем случае, число таких возможностей.

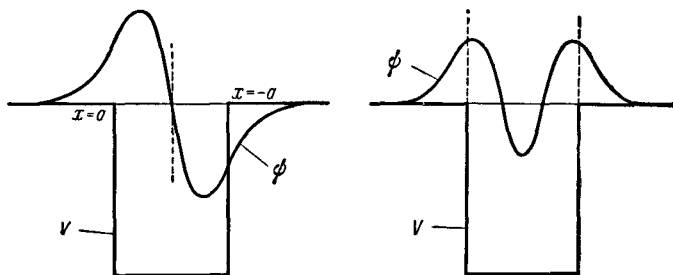


Рис. 46.

Каждое решение может быть описано с помощью ряда нулей (или узлов), которые имеет волновая функция. Например, первое решение, как уже упоминалось, не имеет узлов, второе решение имеет один узел, третье — два и т. д. Обычно число узлов в решении равно числу N в равенстве (11.64).

Решение для волновой функции. Для каждого значения N , для которого существует решение уравнения (11.63), можно теперь определить волновую функцию. Заметим, что когда $|E|$ известно,

то $p_1 = \sqrt{2m|E|}$ и $p_2 = \sqrt{2m(V_0 - |E|)}$ также известны. Это означает, что уравнения (11.57а) и (11.60б), определяющие волновую функцию внутри ямы, могут быть теперь решены, так как полная волновая функция может быть выражена через одну постоянную D , определяемую уравнением (11.58). Постоянная D может быть оценена нормировкой волновой функции.

Задача 9. Показать, найдя выражения для волновой функции, что число узлов равно N .

13. Применение теоремы разложения. В гл. 10, п. 22 указывалось, что любая произвольная функция может быть разложена в ряд по собственным функциям некоторого эрмитовского оператора. Применим теперь эту теорему к оператору Гамильтона для прямоугольной потенциальной ямы. Собственные функции должны включать непрерывный спектр собственных значений для $E > 0$ и дискретный спектр всех связанных состояний с $E < 0$.

С первого взгляда непонятно, почему нужны связанные состояния. Причина заключается в том, что внутри ямы собственные функции для $E > 0$ так искажаются потенциалом, что они вообще не способны выражать определенного типа функций. Функции, которые не могут быть выражены через интеграл от совокупности (континуума) собственных функций, являются в действительности как раз волновыми функциями связанных состояний. Для более детального рассмотрения этого заметим, что собственные функции связанных состояний ортогональны к континууму функций (см. гл. 10, п. 24). Поэтому невозможно разложить функции связанных состояний по континууму функций, так как, согласно (10.55), коэффициент разложения равен

$$C_E = \int \psi_E^*(x) \psi_B(x) dx.$$

Он обращается в нуль, когда ψ_B является волновой функцией связанного состояния и ψ_E принадлежит континууму. Таким образом, чтобы выразить все возможные функции, мы должны суммировать по связанным состояниям и интегрировать по непрерывному спектру.

14. Применение к дейтрону. До сих пор мы рассматривали только одномерную задачу, в то время как все реальные задачи являются трехмерными. Но мы увидим в гл. 15, что радиальная часть волнового уравнения для ψ подобна одномерному волновому уравнению, которое рассматривается здесь. Действительно, для специального случая, когда ψ является функцией только r и не зависит от сферических полярных углов ϑ и φ , волновое уравнение, как будет показано, идентично с одномерным случаем (см. гл. 15, п. 3). Однако в этом случае появляется еще одно новое ограничение: волновая функция должна быть всегда равна нулю в начале координат. Это условие возникает, как мы увидим, из требования,

чтобы определенные функции оставались конечными при $r \rightarrow 0$. Пока мы просто примем это требование.

Для нахождения волновых функций связанных состояний, удовлетворяющих требованию $\psi = 0$ при $x = 0$, обратимся к уравнению (11.57а), которое дает значение ψ внутри потенциальной ямы. В точке $x = 0$ имеем

$$\psi = B + C = 0.$$

Поэтому добавочным требованием является $B = -C$. Из уравнения (11.57а) видно, что это эквивалентно условию

$$\left(1 + \frac{ip_1}{p_2}\right) \exp\left(\frac{-iap_2}{\hbar}\right) = -\left(1 - \frac{ip_1}{p_2}\right) \exp\left(\frac{iap_2}{\hbar}\right).$$

Полагая $p_1/p_2 = \operatorname{tg} \varphi$, получаем

$$\exp\left[-i\left(\frac{ap_2}{\hbar} - \varphi\right)\right] = -\exp\left[i\left(\frac{ap_2}{\hbar} - \varphi\right)\right]$$

или

$$\cos\left(\frac{ap_2}{\hbar} - \varphi\right) = 0.$$

Отсюда

$$\varphi = \frac{ap_2}{\hbar} + \frac{N\pi}{2},$$

где N — нечетное целое число. Сравнивая последнее равенство с равенством (11.62), мы видим, что если N ограничить в уравнении (11.62) нечетными значениями, то эти два уравнения будут эквивалентны. Следовательно, все связанные решения трехмерных задач должны иметь нечетное N . Как показано в п. 10, связанное решение возможно, если выполняется условие $V_0 \geq \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 \left(\frac{\pi}{2}\right)^2$, и, в общем случае, связанное решение с данным значением N возможно, только когда $V_0 \geq \left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 \left(\frac{1}{2m}\right) \left(\frac{N\pi}{2}\right)^2$. Число связанных состояний зависит поэтому от глубины потенциальной ямы, ее ширины и массы частицы.

Дейтрон состоит из нейтрона и протона, связанных друг с другом силой, которая может быть охарактеризована прямоугольной потенциальной ямой (см. п. 3). Экспериментально было найдено, что энергия связи *) равна $2,237 \text{ Мэв}$. Используя радиус, данный в п. 3, $r = 2,8 \cdot 10^{-13} \text{ см}$, можно подсчитать глубину потенциальной ямы V_0 , необходимую для получения такой энергии связи. Известно, что ниже этого уровня других уровней не существует (см. [26], гл. 7), т. е.

*) Энергией связи связанного состояния называют энергию, необходимую для поднятия значения энергии до $E = 0$, при которой частицы уже не связаны друг с другом. Ясно, что энергия связи равна $|E|$ в уравнении (11.64).

имеется только одно связанное состояние. В уравнении (11.63) мы поэтому полагаем $N=1$. Это дает

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{|E|}{V_0 - |E|}} &= -\operatorname{ctg} \sqrt{2m(V_0 - |E|)} \frac{a}{\hbar}, \\ \operatorname{tg} \sqrt{2m(V_0 - |E|)} \frac{a}{\hbar} &= -\sqrt{\frac{V_0 - |E|}{|E|}}. \end{aligned} \quad (11.66)$$

Введем обозначение

$$\sqrt{2m(V_0 - |E|)} \frac{a}{\hbar} = \xi,$$

тогда

$$\operatorname{tg} \xi = -\frac{\hbar}{a} \frac{\xi}{\sqrt{2m|E|}}. \quad (11.67)$$

Так как $|E|$, m и a известны, то можно решить уравнение (11.67) относительно ξ графически и использовать этот результат для определения V_0 . В итоге находим, что $V_0 = 21,2 \text{ Мэв}$. Заметим, что мы должны брать приведенную массу $m = M/2$, где M — масса протона, которая практически равна массе нейтрона. Это делается потому, что в волновом уравнении в действительности имеют дело с относительными координатами нейтрона и протона. Более детально будет рассмотрен этот вопрос в связи с атомом водорода (см. гл. 15, п. 5).

Задача. 10. Получить V_0 способом, предложенным в п. 13.

Заметим, что уравнение (11.66) фактически определяет произведение $\sqrt{V_0 - |E|} a$, а следовательно и $(V_0 - |E|) a^2$. Так как $|E|/V_0$ мало, то, если известна энергия связи дейтрона, можно приближенно определить произведение $V_0 a^2$.

15. Объяснение энергетических уровней с помощью соотношения неопределенностей. Тот факт, что никакие связанные состояния невозможны, если не выполняется условие

$$V_0 > \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{a} \right)^2 \left(\frac{\pi}{2} \right)^2,$$

легко понять с помощью соотношения неопределенностей. Для появления связанного состояния частица должна быть локализована приблизительно в радиусе потенциальной ямы. Чтобы иметь заметную волновую функцию только в области ямы, необходимо также иметь интервал импульсов $\sim \hbar/a$ и, следовательно, интервал энергий $\sim 1/2m (\hbar/a)^2$ (*). Прежде чем частица может быть заключена внутри потенциальной ямы, потенциальная энергия, теряемая при попадании

*) См. гл. 5, п. 5, где подобное рассуждение приводится в связи с наименьшим связанным состоянием атома водорода.

частицы в яму, должна быть больше кинетической энергии, которую частица приобретает просто потому, что она локализуется в объеме радиуса a . Таким образом, никакие связанные состояния невозможны до тех пор, пока не выполняется неравенство

$$V_0 > \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{a} \right)^2.$$

Если потенциал V_0 достаточен лишь для сообщения частице кинетической энергии, необходимой для ее локализации внутри ямы, то энергия связи $|E|$ будет очень мала. Если V_0 возрастает, то и энергия связи становится больше, и в конце концов V_0 становится так велик, что может сообщить кинетическую энергию, при которой волновая функция имеет одно колебание внутри ямы. В этот момент становится возможным новое связанное состояние. Если еще увеличить V_0 , то в конце концов становятся возможными три колебания ψ , затем четыре и т. д. Таким образом, число связанных состояний зависит от того, насколько яма глубже минимальной величины, необходимой для нахождения частицы внутри ямы.

16. Использование наблюдаемых энергетических уровней для получения сведений о потенциале. В атомной теории обычно процесс квантования заключается во введении классической гамильтоновской функции и в образовании оператора Гамильтона путем замены величины p , там где она встречается, на оператор $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. Но во многих случаях неизвестна классическая гамильтоновская функция, так как исследование системы дает исключительно квантовомеханические уровни. Это особенно верно в ядерной физике, где проявляются короткодействующие ядерные силы. Для того чтобы ядерные силы действовали подобно классическим, нужны частицы, у которых длина волны де Бройля $\lambda = \hbar/p$ значительно меньше, чем радиус действия ядерных сил, примерно равный $2,8 \cdot 10^{-13}$ см. Следовательно, должны быть импульсы, значительно большие, чем

$$p \cong \frac{\hbar}{2,8 \cdot 10^{-13}} = \frac{6,6 \cdot 10^{-27}}{2,8 \cdot 10^{-13}} = 2,4 \cdot 10^{-14} \text{ эрг} \cdot \text{сек} \cdot \text{см}^{-1}.$$

Энергия для протонов должна была бы быть больше, чем

$$E = \frac{p^2}{2m} \cong 100 \text{ Мэв}.$$

Большинство экспериментов в ядерной физике имеет дело со значительно меньшими энергиями ($\sim 1 - 20$ Мэв). Очевидно, что при энергиях в 100 Мэв и выше неприменимо представление, по которому систему можно описать волновым уравнением, включающим некоторую определенную потенциальную функцию. Иными словами, при очень высоких энергиях можно ожидать серьезного изменения кван-

товой теории. Поэтому в ядерной области полная формулировка теории с помощью оператора Гамильтона является гипотезой, которая может быть оправдана только успехом ее выводов. Нужно подчеркнуть, однако, что в области атомной физики, которая имеет дело с расстояниями, не меньшими чем 10^{-12} см, основные идеи обычной квантовой теории имеют прочное экспериментальное обоснование. Однако даже здесь часто бывает необходимо уточнять оператор Гамильтона добавлением малых членов, например, связанных с существованием электронного спина (см. гл. 17), которые не содержатся в классической гамильтоновской функции.

Таким образом, в определенных задачах, особенно в ядерной физике, необходимо постулировать ту или иную потенциальную функцию и попытаться оправдать это, рассматривая согласие предсказываемых результатов с экспериментом. Одним из наиболее важных результатов являются энергетические уровни рассматриваемых систем. Например, для дейтрона, как мы видели, поскольку имеется только один энергетический уровень с глубиной $2,237$ Мэв, можно определить лишь произведение глубины потенциальной ямы V_0 на квадрат ее радиуса a^2 . Если бы имелось большее число энергетических уровней, то можно было бы прийти к различным выводам о природе потенциала. Следовательно, можно использовать наблюдаемые энергетические уровни как средство для исследования потенциальных функций, которые мы не можем непосредственно измерить классическим образом. Далее еще много раз мы будем возвращаться к обсуждению этих вопросов, а также обратим особое внимание на роль явлений рассеяния как средства исследования природы атомных и ядерных систем (см. гл. 21, п. 11).

17. Волновые пакеты как континуум собственных функций. До сих пор при рассмотрении континуума собственных функций ($E > 0$) для прямоугольной потенциальной ямы использовались решения в виде волн, которые распространялись во всем пространстве. Такие решения в действительности являются абстракцией, никогда не реализуемой на практике, так как все реальные волны так или иначе ограничены. Волновой пакет дает более близкое представление о реальных экспериментах.

Например, начнем с падающего пакета, который находится далеко от потенциальной ямы. Этот пакет движется по направлению к яме, постепенно расплываясь. Когда он ударяется о яму, часть его отражается, а часть проникает в яму *). Волна внутри ямы претерпевает многократное отражение, и некоторая часть ее выходит, образуя прошедшую волну, в то время другая часть возвращается

*) В каждый данный момент электрон или отражается, или проходит, интенсивности же соответствующих волн дают вероятности осуществления этих процессов.

обратно. Отраженная волна, вышедшая из ямы, интерферирует с волной, отраженной прямо от ямы. Когда фазы противоположны, то отраженная волна гасится вследствие интерференции этих двух частей, и таким образом остается только прошедшая волна и наступает резонансная прозрачность, описанная в связи с уравнением (11.50). В общем случае, однако, присутствуют обе волны: и отраженная, и прошедшая. Если исходить из первоначального волнового пакета, то отраженная и прошедшая волны также приобретают форму пакетов. В таком случае прохождение волны сквозь потенциальный барьер может быть описано как функция времени. Через длительный промежуток времени в потенциальной яме не остается никаких частей волны.

Поучительно детально рассмотреть решение волнового уравнения, соответствующее граничным условиям первоначального волнового пакета при $t \rightarrow -\infty$. Начнем с решения в области $x < -a$ (см. рис. 40).

Для зависящего от времени решения имеем

$$\psi(p_1) = \left[D(p_1) \exp\left(\frac{ip_1 x}{\hbar}\right) + F(p_1) \exp\left(-\frac{ip_1 x}{\hbar}\right) \right] \exp\left[-\frac{iE(p_1)t}{\hbar}\right], \quad (11.68)$$

где D и F *) в общем случае являются функциями p_1 и $E(p_1) = p_1^2/2m$. Для образования пакета необходимо проинтегрировать ψ по p_1 с весовым множителем $f(p_1 - p_0)$, имеющим максимум вблизи величины, которую обозначим через p_0 . Получаем

$$\psi(x, t) = \int f(p_1 - p_0) \exp\left[-\frac{iE(p_1)t}{\hbar}\right] \left[D(p_1) \exp\left(\frac{ip_1 x}{\hbar}\right) + F(p_1) \exp\left(-\frac{ip_1 x}{\hbar}\right) \right] dp_1. \quad (11.69)$$

В общем случае D и F — совершенно гладкие функции p_1 , определяемые уравнениями (11.47) и (11.48). Для удобства можно выбрать A такое, что $D(p_1) = 1$. Такой выбор дает

$$\frac{A}{4} = \exp\left(-\frac{2ip_2 a}{\hbar}\right) \left[\left(1 + \frac{p_2}{p_1}\right) \left(1 + \frac{p_1}{p_2}\right) \exp\left(-\frac{2ip_2 a}{\hbar}\right) + \left(1 - \frac{p_2}{p_1}\right) \left(1 - \frac{p_1}{p_2}\right) \exp\left(\frac{2ip_2 a}{\hbar}\right) \right]^{-1}, \quad (11.70)$$

*) Здесь введено обозначение F вместо E , употреблявшегося в том же месте в уравнении (11.42).

и после подстановки находим

$$F = \frac{-i(p_1^2 - p_2^2) \exp\left(-\frac{2ip_2a}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{2p_2a}{\hbar}\right) \left[2p_1p_2 \cos\left(\frac{2p_2a}{\hbar}\right) + i(p_1^2 + p_2^2) \sin\left(\frac{2p_2a}{\hbar}\right)\right]}{\left[4p_1^2p_2^2 + (p_1^2 - p_2^2) \sin^2\left(\frac{2p_2a}{\hbar}\right)\right]}. \quad (11.71)$$

Часто бывает удобно записать

$$F(p_1) = R(p_1) e^{-i\varphi_1}, \quad (11.72)$$

где $R(p_1) = |f(p_1)|$.

Заметив, что p_2 выражено через p_1 , получим

$$\varphi_1 = \frac{2p_2a}{\hbar} + \operatorname{arctg} \left(\frac{2p_1p_2}{p_1^2 + p_2^2} \operatorname{ctg} \frac{2p_2a}{\hbar} \right). \quad (11.73)$$

Подстановка этих величин в уравнение (11.69) для ψ дает

$$\psi(x, t) = \int f(p_1 - p_0) \exp\left(-\frac{iE(p_1)t}{\hbar}\right) \left\{ \exp\left(\frac{ip_1x}{\hbar}\right) + \right. \\ \left. + R(p_1) \exp\left[-i\left(\frac{p_1x}{\hbar} + \varphi_1(p_1)\right)\right] \right\} dp_1. \quad (11.74)$$

Чтобы найти максимум ψ , будем искать точку, где фаза волны имеет экстремум при дифференцировании по p_1 . Это обеспечивает то, что многие волны с различными p_1 будут складываться по фазе, образуя максимум (см. гл. 3, п. 2).

Для падающей волны фаза имеет экстремум, когда

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial p_1} \left(p_1 \frac{x}{\hbar} - E(p_1) \frac{t}{\hbar} \right)_{p_1=p_0} &= 0 \\ \text{или когда} \quad x &= \left(\frac{\partial E}{\partial p_1} \right)_{p_1=p_0} t = \frac{p_0}{m} t. \end{aligned} \right\} \quad (11.75)$$

При $t \rightarrow -\infty$ эта точка, как мы видим, отодвигается бесконечно влево. Но при $t \rightarrow +\infty$ эта точка должна была бы быть при $x \rightarrow +\infty$. Так как первоначальная волновая функция имеет смысл только для отрицательных x , то ясно, что после $t=0$ первоначальная волна совершенно исчезает, как это и происходит.

Рассмотрим теперь отраженную волну. Условием для экстремума фазы является

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial p_1} \left(p_1 \frac{x}{\hbar} + \varphi_1(p_1) + E(p_1) \frac{t}{\hbar} \right)_{p_1=p_0} &= 0, \\ x &= - \left(\frac{\partial E}{\partial p_1} \right)_{p_1=p_0} t - \hbar \left(\frac{\partial \varphi_1}{\partial p_1} \right)_{p_1=p_0} = \\ &= - \frac{p_0}{m} t - \hbar \left(\frac{\partial \varphi_1}{\partial p_1} \right)_{p_1=p_0} = -v_0 t - \hbar \left(\frac{\partial \varphi_1}{\partial p_1} \right)_{p_1=p_0}. \end{aligned} \right\} \quad (11.76)$$

При $t \rightarrow +\infty$ мы видим, что $x \rightarrow -\infty$. Поэтому отраженный пакет появляется после того, как первоначальный волновой пакет ударился о яму. Значение члена, включающего $\partial\varphi_1/\partial p_1$, будет рассмотрено в п. 19.

18. Волновой пакет для прошедшей волны. Амплитуда прошедшей волны равна

$$\psi(x, t) = \int f(p_1 - p_0) \exp\left[-\frac{iE(p_1)t}{\hbar}\right] A(p_1) \exp\left(\frac{ip_1 x}{\hbar}\right) dp_1.$$

Так же, как в уравнении (11.72), запишем

$$A = |A| e^{i\varphi_2}. \quad (11.77)$$

Но, согласно уравнению (11.70),

$$A = \frac{\exp(-2ip_2 a/\hbar) [\cos(2p_2 a/\hbar) + i/2(p_1/p_2 + p_2/p_1) \sin(2p_2 a/\hbar)]}{\cos^2(2p_2 a/\hbar) + \frac{1}{4}(p_1/p_2 + p_2/p_1)^2 \sin^2(2p_2 a/\hbar)}. \quad (11.78)$$

Фаза φ_2 может тогда быть записана в виде

$$\varphi_2 = -\frac{2p_2 a}{\hbar} + \operatorname{arctg}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{p_1}{p_2} + \frac{p_2}{p_1}\right) \operatorname{tg} 2p_2 \frac{a}{\hbar}\right]. \quad (11.79)$$

Волновая функция принимает форму

$$\psi(x, t) = \int f(p_1 - p_0) |A| \exp\left\{i\left[p_1 \frac{x}{\hbar} + \varphi_2 - E(p_1) \frac{t}{\hbar}\right]\right\} dp_1. \quad (11.80)$$

Максимум волнового пакета получается, когда производная показателя экспоненты по аргументу p_1 равна нулю или когда

$$x = \left(\frac{\partial E}{\partial p_1}\right)_{p_1=p_0} t - \hbar \left(\frac{\partial \varphi_2}{\partial p_1}\right)_{p_1=p_0} = \frac{p_0}{m} t - \hbar \left(\frac{\partial \varphi_2}{\partial p_1}\right)_{p_1=p_0}. \quad (11.81)$$

При $t \rightarrow +\infty$ максимум получается в области $x > a$. Таким образом, через некоторое время появляется прошедшая волна, которая распространяется с групповой скоростью $v_0 = p_0/m$.

19. Время замедления волны при прохождении потенциальной ямы. Без потенциальной ямы, вызывающей отражение волны, следовало бы ожидать движения проходящей волны с центром в $x = p_0 t/m$. Второй член в уравнении (11.81) представляет собой временную задержку. Это видно из того, что заданное значение x при наличии этого члена достигается позднее, чем без него.

Оценим теперь временную задержку падающей волны

$$\Delta t = \frac{\hbar}{v_0} \left(\frac{\partial \varphi_2}{\partial p_1}\right)_{p_1=p_0}. \quad (11.82)$$

При дифференцировании φ_2 нужно использовать соотношение

$$p_2^2 = 2m(E - V_0) = p_1^2 - 2mV_0.$$

Отсюда

$$p_2 \frac{\partial p_2}{\partial p_1} = p_1 \quad \text{или} \quad \frac{\partial p_2}{\partial p_1} = \frac{p_1}{p_2}.$$

Тогда из уравнения (11.79) получим

$$\begin{aligned} \hbar \frac{\partial \varphi_2}{\partial p_1} = & -2a \frac{p_1}{p_2} + \frac{\hbar}{2} \times \\ & \times \frac{\left\{ \left(\frac{2}{p_2} - \frac{p_2}{p_1^2} - \frac{p_1^2}{p_2^3} \right) \operatorname{tg} 2p_2 \frac{a}{\hbar} + \frac{2a}{\hbar} \left[\left(\frac{p_1}{p_2} \right)^2 + 1 \right] \sec^2 \left(2p_2 \frac{a}{\hbar} \right) \right\}}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{p_1}{p_2} + \frac{p_2}{p_1} \right)^2 \operatorname{tg}^2 \left(2p_2 \frac{a}{\hbar} \right)}. \quad (11.83) \end{aligned}$$

Легко показать, что, когда $p_1 = p_2$ (нет барьера), $\Delta t = 0$. Если $p_1 \neq p_2$, результат несколько сложнее, так как существуют два эффекта, действие которых противоположно. Во-первых, частица ускоряется, когда она входит в яму; этот эффект стремится сделать Δt отрицательным. Во-вторых, частица многократно отражается внутри ямы; этот эффект стремится сделать Δt положительным. Вблизи резонансной прозрачности последний эффект будет преобладать, особенно если $p_1 \ll p_2$, так как коэффициент отражения очень высок. Вычислим теперь Δt . Заметим, что при резонансной прозрачности

$$\operatorname{tg} \frac{2p_2 a}{\hbar} = 0 \quad \text{и} \quad \sec^2 \frac{2p_2 a}{\hbar} = 1.$$

Получаем

$$v_0 \Delta t = -\frac{2ap_1}{p_2} + a \left[1 + \left(\frac{p_1}{p_2} \right)^2 \right]. \quad (11.84)$$

Мы видим, что, когда p_1/p_2 мало, Δt положительно и приближенно равно a/v_0 , где v_0 — скорость частицы *вне* ямы. Так как в действительности частица внутри ямы движется быстрее, пропорционально отношению p_2/p_1 , то число отражений ее должно быть порядка p_2/p_1 . Согласно уравнению (11.11), это число пропорционально величине, обратной коэффициенту прозрачности. Отсюда видно, что задержка вызывается только процессом отражения.

Задача 11. Найти временную задержку для отраженной волны при резонансной прозрачности и объяснить результат как следствие отражения волны внутри ямы.

20. Метастабильные (или виртуальные) состояния микрочастицы в потенциальной яме. Предыдущее рассмотрение указывает, что, даже когда микробъект имеет энергию, достаточную для выхода из ямы, он может, войдя в нее, испытать многократное отражение,

прежде чем получит возможность покинуть ее. Это имеет место, если выполняется неравенство $p_1 \ll p_2$, т. е. если глубина ямы значительно больше, чем кинетическая энергия частицы вне ямы, и если условия таковы, что возможна резонансная прозрачность ($2p_2a/\hbar = N\pi$). (С помощью уравнения (11.84) можно легко показать, что если мы далеки от такого резонанса, то временная задержка не очень велика, и мала вероятность найти частицу внутри ямы.) Если число отражений волны очень велико, то кажется, что система находится почти в стационарном состоянии, которое, однако, постепенно нарушается по мере того, как волна медленно выходит из ямы после многих внутренних отражений. Такое состояние называется *виртуальным*, или *метастабильным*, уровнем. Его энергия положительна в противоположность истинному связанному состоянию, для которого она всегда отрицательна. Время жизни метастабильного состояния определяется величиной временной задержки Δt , вычисляемой из уравнения (11.84).

Поскольку волновая функция метастабильного состояния представляется волновым пакетом, проходящим сквозь ядро в течение времени Δt , то, согласно соотношению неопределенностей, энергия этого состояния должна флуктуировать на величину

$$\Delta E \cong \frac{\hbar}{\Delta t}.$$

Можно получить тот же результат и иначе: метастабильное состояние может иметь физический смысл, только когда падающий волновой пакет так узок, что он проходит через заданную точку за время, меньшее, чем временная задержка, возникающая внутри ямы. Если это условие не выполняется, то временная задержка смажется первоначальной шириной самого пакета и не будет наблюдаться. Пакет будет уже, чем Δt , если величина изменения энергии больше $\hbar/\Delta t$. Таким образом, метастабильное состояние может существовать, только когда неопределенность энергии больше этой величины.

21. Метастабильное синглетное состояние дейтрона. Важным примером метастабильного состояния, в котором частица временно связана отражениями от краев потенциальной ямы, является так называемое *синглетное состояние* дейтрона. Выше указывалось, что нейтрон притягивается к протону с потенциальной энергией 21,2 Мэв. В действительности потенциал таков, только когда спин нейтрона параллелен спину протона. Если спины антипараллельны, то потенциал меньше ([26], стр. 43) и равен всего лишь 11,85 Мэв. В трехмерной задаче должно быть $\psi = 0$ в начале координат. Это уменьшение потенциала достаточно для предотвращения появления у волновой функции кривизны, направленной вниз и приводящей к экспоненциальному спаду у краев ямы. Поэтому если спины антипараллельны, то связанных состояний не существует. В действительности для $E = 0$

получается, что волна, начиная с нуля в начале координат, не достигает полностью фазы $\pi/2$ на краю ямы. Этот результат иллюстрирует рис. 47. Но при малой положительной энергии ($\cong 40$ кэв) фаза становится равной $\pi/2$ на краю ямы. Согласно рассуждениям, приведенным после уравнения (11.50), это является условием для резонансной прозрачности и, следовательно, для существования виртуального уровня. В результате здесь должен быть метастабильный синглетный уровень с очень малой положительной энергией. Время жизни этого состояния равно

$$\Delta t = \frac{a}{v_0}, \quad (11.85)$$

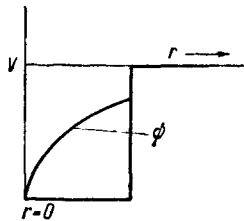


Рис. 47.

где v_0 — скорость вне ямы. Число отражений есть величина порядка $\frac{v_{\text{внутри}}}{v_0} = \sqrt{\frac{E + V_0}{E}}$. При $V_0 = 20$ Мэв и $E \cong 40$ кэв это число порядка 20.

Мы увидим в гл. 12, п. 18, что возможны значительно более длительные метастабильные состояния вследствие отражения частицы от потенциального барьера. В действительности метастабильное состояние чрезвычайно распространено в ядерной физике и является одним из наиболее важных ядерных явлений, которые изучаются в настоящее время.

КЛАССИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ. ПРИБЛИЖЕНИЕ ВКБ

1. Введение. В предыдущей главе изучались системы, у которых потенциал как функция координаты изменялся скачком. Рассмотрим теперь противоположный случай, когда потенциальная энергия изменяется очень медленно как функция координаты. Разрывность в потенциале соответствует разрывности показателя преломления, и, как мы видели, волны электронов отражаются этими разрывами подобно световым волнам. Так как медленное изменение потенциала аналогично медленному изменению показателя преломления, то можно ожидать, что поведение электронов в этом случае следует изучать по аналогии с задачами волновой оптики.

В среде, показатель преломления которой изменяется непрерывно, свет не отражается, хотя его путь может быть искривлен в результате преломления (качественно эта задача обсуждалась в гл. 3, п. 9). Какова критическая скорость изменения показателя преломления с изменением координаты, при которой отражается световая волна? Мы увидим, что большей частью отражение происходит только когда длина волны $\lambda = c/n$ изменяется на большую часть своей величины на расстояниях порядка своей длины. Изменение длины волны $\delta\lambda$, происходящее на расстоянии δx , равно

$$\delta\lambda = \frac{\partial\lambda}{\partial x} \delta x. \quad (12.1)$$

Полагая $\delta x = \lambda$, мы найдем, что условием для несущественных отражений волн будет

$$|\delta\lambda| = \left| \frac{\partial\lambda}{\partial x} \lambda \right| \ll \lambda \quad \text{или} \quad \left| \frac{\partial\lambda}{\partial x} \right| \ll 1. \quad (12.2)$$

Точно те же рассуждения приложимы и к волнам электронов. Если воспользоваться соотношением де Бройля $\lambda = h/p$, то условием для отсутствия отражения будет

$$\left| \frac{\partial\lambda}{\partial x} \right| = \left| \frac{h}{p^2} \frac{\partial p}{\partial x} \right| \ll 1. \quad (12.3)$$

Подставляя $p^2 = 2m(E - V)$, получим

$$\frac{\hbar m \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right|}{[2m(E - V)]^{3/2}} \ll 1 \quad \text{или} \quad \frac{\lambda \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right|}{2(E - V)} \ll 1. \quad (12.4)$$

Следовательно, для отсутствия отраженной волны необходимо, чтобы потенциальная энергия была медленно изменяющейся функцией координаты и чтобы $E - V$ не было слишком мало.

В трехмерной задаче волна будет преломляться, даже если она не отражается. Поэтому волновой пакет будет перемещаться по криволинейной траектории, а не по прямой. Эта искривленная траектория должна в точности совпадать с путем, который предсказывается классической теорией для частицы в силовом поле, поскольку (как мы показали в гл. 9) уравнение Шрёдингера для волновой функции в классических пределах приводит к уравнениям движения Ньютона. Таким образом, когда изменение потенциальной энергии в пределах длины волны де Бройля мало по сравнению с кинетической энергией, специфически не проявляются квантовомеханические черты, обусловленные волновыми свойствами материи, и вполне достаточно классического описания.

Из уравнения (12.3) видно, что классическая теория применима, когда $\hbar$ мало по сравнению с $\left(\frac{1}{p^2} \frac{\partial p}{\partial x} \right)^{-1}$. Широкая область применимости классической физики поэтому фактически связана с тем, что в сравнении с обычными масштабами постоянная $\hbar$ — очень малая величина. Мы можем вообразить себе мир, в котором $\hbar$ значительно больше; в таком мире квантовомеханические эффекты проявлялись бы и в макроскопических масштабах.

2. Приближение ВКБ. Когда уравнение (12.3) удовлетворяется, т. е. классический предел достигнут, можно воспользоваться так называемым приближением ВКБ (Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна). В этом приближении используется медленное изменение длины волны в предположении, что волновая функция мало отличается от той формы, которую она имела бы для постоянного V , а именно

$$\psi = \exp \left(\frac{ipx}{\hbar} \right), \quad (12.5)$$

где $p = \sqrt{2m(E - V)}$. Это наводит на мысль, что волновую функцию удобнее записать в виде

$$\psi = \exp \left(\frac{iS}{\hbar} \right), \quad (12.6)$$

где S — функция от x . В общем случае, S может быть и комплексной функцией. Если V почти постоянно, то можно ожидать, что S приближенно равна px , но для получения более точной величины

нужно решить уравнение Шрёдингера. Для этого при произвольном потенциале V представим S в виде ряда по степеням $\hbar$:

$$S = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \frac{\hbar^2}{2} S_2(x) + \dots \quad (12.7)$$

Первые несколько членов этого ряда будут давать хорошее приближение только при условии, что отношения $\hbar S_1/S_0$, $\hbar S_2/2S_1$ и т. д. все очень малы. Так как мы уже знаем, что при постоянном потенциале функция $S_0 = px$, а S_1 , S_2 и т. д. равны все нулю, то можно ожидать удовлетворения этого требования, когда V , как функция x , изменяется очень медленно.

В известном смысле можно сказать, что это приближение требует, чтобы $\hbar$ было малым. Если мы, например, вообразим себе ряд миров, где $\hbar$ становится постепенно все меньше и меньше, то это разложение будет непрерывно становиться все точнее. Так как классическое описание тем точнее, чем меньше $\hbar$, то ясно, что такое разложение хорошо сходится лишь в классическом пределе.

Для определения функции S подставляем функцию (12.6) в уравнение Шрёдингера:

$$0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (V - E) \psi = \\ = \left\{ \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 - i\hbar \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right] + (V - E) \right\} \exp \left(\frac{iS}{\hbar} \right)$$

или

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + (V - E) - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = 0. \quad (12.8)$$

Подставим теперь разложение (12.7) для S в уравнение (12.8) и соберем все члены с соответствующими степенями $\hbar$. В результате получается (с точностью до членов второго порядка относительно $\hbar$)

$$0 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0}{\partial x} \right)^2 + (V - E) + \frac{\hbar}{m} \left(\frac{\partial S_0}{\partial x} \frac{\partial S_1}{\partial x} - \frac{i}{2} \frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2} \right) + \\ + \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial S_0}{\partial x} \frac{\partial S_2}{\partial x} + \left(\frac{\partial S_1}{\partial x} \right)^2 - i \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} \right]. \quad (12.9)$$

Так как это уравнение должно удовлетворяться независимо от значения постоянной $\hbar$, то необходимо равенство нулю коэффициентов при любой степени $\hbar$. Это требование приводит к следующей системе уравнений:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0}{\partial x} \right)^2 + V - E = 0, \quad (12.10)$$

$$\frac{\partial S_0}{\partial x} \frac{\partial S_1}{\partial x} - \frac{i}{2} \frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2} = 0, \quad (12.11)$$

$$\frac{\partial S_0}{\partial x} \frac{\partial S_2}{\partial x} + \left(\frac{\partial S_1}{\partial x} \right)^2 - i \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} = 0 \quad (12.12)$$

и так далее.

Уравнения могут быть последовательно решены: первое уравнение определяет S_0 через $V - E$, второе — S_1 через S_0 , третье — S_2 через S_1 и S_0 , и так далее. Решая их, мы получим

$$\frac{\partial S_0}{\partial x} = \pm \sqrt{2m(E - V)}, \quad (12.13)$$

$$S_0 = \pm \int_{x_0}^x \sqrt{2m(E - V)} dx.$$

Положим здесь $E > V$ (случай $E < V$ будет рассмотрен в п. 7)

$$\frac{\partial S_1}{\partial x} = \frac{i}{2} \frac{1}{\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)} \frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2} = \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial x} \ln \frac{\partial S_0}{\partial x}, \quad (12.14)$$

$$S_1 = \frac{i}{2} \ln \frac{\partial S_0}{\partial x},$$

$$\exp(iS_1) = \frac{1}{\sqrt{\frac{\partial S_0}{\partial x}}} = \frac{1}{\sqrt{2m(E - V)}};$$

аналогично получаем

$$S_2 = \frac{1}{2} \frac{m \left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)}{[2m(E - V)]^{3/2}} - \frac{1}{4} \int \frac{m^2 \left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)^2 dx}{[2m(E - V)]^{5/2}}. \quad (12.15)$$

Так как S_1 есть логарифм от производной $\partial S_0 / \partial x$, то, в общем случае, эта величина немалая по сравнению с S_0 . Поэтому и S_0 , и S_1 должны быть сохранены. С другой стороны, из уравнения (12.15) видно, что S_2 будет мало, когда мало $\partial V / \partial x$ и $E - V$ не слишком близко к нулю. Можно также показать, что члены более высокого порядка (S_3 , S_4 и т. д.) будут малы, если малы значения всех производных от V . Таким образом, приближение ВКБ будет точно, когда V — достаточно гладкая и медленно изменяющаяся функция.

Для получения более точного критерия применимости приближения ВКБ потребуем, чтобы абсолютная величина полного смещения фазы, получающаяся во втором приближении, а именно $|\hbar S_2 / 2|$, была мала по сравнению с единицей. Исследование интеграла в уравнении (12.15) показывает, что он является величиной того же порядка, что и внеинтегральный член слева от него. Наш критерий поэтому приобретает вид

$$\frac{\hbar m \left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)}{[2m(E - V)]^{3/2}} \ll 1. \quad (12.16)$$

Но это точно тот же результат, который дается выражением (12.4), означающим, что относительное изменение длины волны должно быть малым на расстоянии самой длины волны.

Подобный критерий может быть получен и при учете производных V более высокого порядка, но мы не будем здесь делать этого.

Решение в приближении ВКБ будет тогда иметь вид (если включить множитель $\sqrt{m}$ в постоянные A и B)

$$\psi = \frac{A}{\sqrt[4]{E-V(x)}} \exp \left[i \int_{x_0}^x \sqrt{2m(E-V)} \frac{dx}{\hbar} \right] + \\ + \frac{B}{\sqrt[4]{E-V(x)}} \exp \left[-i \int_{x_0}^x \sqrt{2m(E-V)} \frac{dx}{\hbar} \right], \quad (12.17)$$

где A и B — произвольные постоянные. Положительный показатель соответствует волне, движущейся в положительном направлении, а отрицательный — волне, движущейся в отрицательном направлении. Для частного случая, когда потенциал V постоянен, решение (12.17) сводится соответственно к плоским волнам $\exp(ipx/\hbar)$ и $\exp(-ipx/\hbar)$.

3. Приближение ВКБ как асимптотическое разложение. Можно показать, что ряд (12.7) не сходится, а является асимптотическим разложением для S . Это означает, что если взять конечное число членов, то всегда можно найти такое малое значение $\hbar$, при котором разность между конечной суммой и истинным значением S будет меньше сколь угодно малого произвольно выбранного числа. Все же, если мы возьмем большее число членов ряда, то разложение может начать удаляться от истинного значения S . Вообще лучше всего для такого разложения брать только один или два члена и применять его только в случаях, когда остающиеся члены малы.

4. Физическая интерпретация решений с помощью классического распределения частиц. Рассмотрим частный случай, когда $B=0$. Вероятность того, что частица находится между x и $x+dx$, равна тогда

$$P(x) = \psi^* \psi = \frac{|A|^2}{\sqrt{E-V}} = \frac{|A|^2 \sqrt{\frac{2}{m}}}{v(x)}, \quad (12.18)$$

где v — классическая скорость частицы. Плотность тока вероятности равна

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right] = v(x) P(x). \quad (12.19)$$

Эта волновая функция в таком случае соответствует распределению частиц с плотностью вероятности, обратно пропорциональной величине классической скорости, и со средней скоростью, равной классической. Но это почти точно то же самое, чего можно ожидать в классическом статистическом ансамбле, так как время пребывания частицы в некоторой области обратно пропорционально ее скорости

в этой области. Поэтому $\psi^*\psi$ является в данном приближении такой же величиной, как и классическая функция распределения вероятности. Фаза S также имеет физический смысл: скорость ее изменения с изменением координаты $\partial S/\partial x$ равна среднему значению импульса. Так как абсолютная величина S не может быть определена, то, следовательно, классическое распределение, которому соответствует волновая функция приближения ВКБ, таково, что в нем фаза

$S(x) = \int_{x_0}^x \sqrt{2m(E - V)}$ совершенно неизвестна, в то время как энергия E известна точно. Итак, первый эффект квантовой теории (только в приближении ВКБ) заключается в том, что, оставляя неизменным движение частиц, заменяют описание с помощью индивидуальных частиц описанием с помощью статистического распределения частиц, однородно распределенных по фазе S . Для частного случая свободной частицы $S = p(x - x_0)$. В этом случае однородное распределение по S означает однородное распределение по x . Распределение по x сохраняется, даже если V непостоянен, но, как мы видели, вероятность уже не будет больше однородной и будет изменяться как $1/v(x)$.

Нужно заметить, что $P(x) \sim 1/v$ характерно только для приближения ВКБ, а не является общим типом изменения P .

Задача 1. Показать для прямоугольной потенциальной ямы при $E > 0$, что $\psi^*\psi$ не пропорционально $1/v$ (см. гл. 11, пп. 10 и 12).

5. Волновые пакеты. Решение, зависящее от времени. Приближенное решение волнового уравнения, зависящее от времени, имеет вид

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{Vp}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S_0(x, E) - Et] \right\}. \quad (12.20)$$

Запишем $S_0(x, E) - Et = S(x, t, E)$. Функция S , которая является фазой волновой функции, также равна функции, появляющейся в классической механике, а именно функции действия [3]. Для доказательства этого покажем, что S удовлетворяет следующим дифференциальным уравнениям:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t} &= -E, & \frac{\partial S}{\partial x} &= p, \\ \frac{\partial S}{\partial x_0} &= -p_0, & -\frac{\partial S}{\partial t} &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2. \end{aligned} \right\} \quad (12.21)$$

Это — как раз те уравнения, которые определяют функцию действия. Таким образом, в классическом пределе фаза волновой функции приближается к функции, уже изученной Гамильтоном в XIX веке при попытке получить аналогию между механикой и геометрической оптикой. Действительно, Гамильтон показал совпадение уравнений траекторий частиц в классической механике с уравнениями, опреде-

ляющими направление световых лучей в геометрической оптике, при условии, что эти лучи получены из волн при помощи принципа Гюйгенса, в котором за фазу волны берется функция S . Не удивительно поэтому, что фаза S также появляется как промежуточная функция при выводе связи между волновой теорией квантовой механики и корпускулярной теорией классической механики.

Для более ясного выявления этой связи образуем волновой пакет, интегрируя по малому интервалу энергий:

$$\psi(x, t) = \int \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(x, t, E)\right] f(E - E_0) \frac{dE}{\sqrt{p}}. \quad (12.22)$$

Центр пакета будет находиться там, где волны с различной энергией стремятся остаться в фазе или где $\frac{\partial S}{\partial E} = 0$. Но

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial S_0}{\partial E} - t. \quad (12.23)$$

Таким образом, получаем

$$t = \frac{\partial S_0}{\partial E} = \frac{\partial}{\partial E} \int_{x_0}^x \sqrt{2m(E - V)} dx = \int_{x_0}^x \sqrt{\frac{m}{2(E - V)}} dx = \int_{x_0}^x \frac{dx}{v(x)}. \quad (12.24)$$

Центр волнового пакета проходит через точку x в момент времени

$$t = \int_{x_0}^x \frac{dx}{v}. \quad \text{Но это как раз то время, которое необходимо частице,}$$

чтобы пройти расстояние от x_0 до x , согласно классической физике. Итак, центры волновых пакетов движутся с классической скоростью. Этого и следовало ожидать, поскольку уравнение Шрёдингера выбиралось так, чтобы в классическом пределе оно приводило к ньютоновским законам движения. Однако нужно заметить, что для определения времени прохождения данной точки с точностью до Δt нужно выбрать интервал энергий $\Delta E \cong \hbar/\Delta t$.

Задача 2. Доказать указанное выше утверждение.

6. Приближение ВКБ, зависящее от времени, в трехмерном случае. По аналогии с одномерным случаем можно записать

$$\psi = e^{if/\hbar}. \quad (12.25)$$

Трехмерное временное уравнение Шрёдингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi. \quad (12.26)$$

Уравнение для f принимает вид

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{2m} (\text{grad } f)^2 + \frac{\hbar}{2mi} \nabla^2 f + V. \quad (12.27)$$

Записав

$$f = f_0 + \frac{\hbar}{i} f_1 + \dots, \quad (12.28)$$

получаем

$$-\frac{\partial f_0}{\partial t} = \frac{1}{2m} (\text{grad } f_0)^2 + V, \quad (12.29)$$

$$-\frac{\partial f_1}{\partial t} = \frac{1}{m} \text{grad } f_0 \text{ grad } f_1 + \nabla^2 \frac{f_0}{2m}. \quad (12.30)$$

Первое из этих уравнений известно в классической механике как уравнение Гамильтона — Якоби [3]. Оно определяет функцию действия, обозначенную выше через S . Записав $f_0 = S_0 - Et$, получим

$$\frac{1}{2m} (\text{grad } S_0)^2 + V = E. \quad (12.31)$$

Это есть трехмерное обобщение уравнения для функции S_0 , полученной в уравнениях (12.21).

Смысл уравнения (12.30) также легко понять. Прежде всего запишем

$$P(x) = \psi^* \psi = e^{2f_1}. \quad (12.32)$$

Затем заметим, что ток вероятности равен

$$\mathbf{S}(x) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \text{grad } \psi - \psi \text{ grad } \psi^*) = \frac{e^{2f_1}}{m} \text{grad } f_1 = \frac{P(x)}{m} \text{grad } f_1. \quad (12.33)$$

Так как $\mathbf{S}(x)$ есть также $\mathbf{v} P(x)$, где $\mathbf{v}$ означает скорость, то имеем

$$\mathbf{v} = \text{grad } \frac{f_1}{m}. \quad (12.34)$$

Поэтому пишем

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2P} \frac{\partial P}{\partial t} &= \frac{\partial f_1}{\partial t}; \\ \frac{1}{2P} \text{grad } P &= \text{grad } f_1; \\ \frac{\nabla^2 f_0}{m} &= \text{div grad } \frac{f_0}{m} = \text{div } \mathbf{v}. \end{aligned} \right\} \quad (12.35)$$

При таких заменах уравнение (12.30) принимает вид

$$-\frac{1}{2P} \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\mathbf{v} \text{ grad } P}{2P} + \text{div } \frac{\mathbf{v}}{2} \quad (12.36a)$$

или

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \mathbf{v} \text{ grad } P + P \text{ div } \mathbf{v} = \frac{\partial P}{\partial t} + \text{div } (\mathbf{v} P) = 0. \quad (12.36b)$$

Последнее уравнение означает, что изменение вероятности в данной области вызывается нескомпенсированным током вероятности vP . Следовательно, в рамках приближения ВКБ вероятность может рассматриваться в чисто классическом смысле, так как классическое распределение вероятности $P(x)$ будет также иметь ток вероятности $S(x) = vP(x)$.

7. Проникновение через барьер. Как и в случае прямоугольного потенциала, приближение ВКБ дает вещественные экспоненциальные решения, когда $V > E$. Решение имеет вид

$$\psi = \frac{1}{\sqrt[4]{2m(E-V)}} \left\{ A \exp \left[\int_{x_0}^x \sqrt{2m(V-E)} \frac{dx}{\hbar} \right] + B \exp \left[- \int_{x_0}^x \sqrt{2m(V-E)} \frac{dx}{\hbar} \right] \right\}, \quad (12.37)$$

где A и B — произвольные постоянные. Таким образом, свойство проникновения через барьер не ограничивается прямоугольными потенциалами, но существует для всех видов потенциалов.

8. Формулы связи. Для рассмотрения задачи проникновения через барьер, когда применимо приближение ВКБ, нужно найти

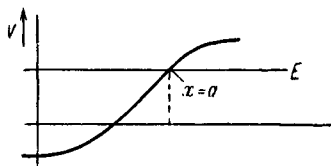


Рис. 48.

связь решений для областей, где $V > E$ и где $E > V$. Рассмотрим, например, потенциальный барьер, изображенный на рис. 48. Предположим, что энергия частицы E такова, что $E = V$ в точке $x = a$. С классической точки зрения частица замедлится до нулевой скорости в этой точке и затем повернет назад. Однако если следовать кван-

товомеханическим представлениям, то волна проникнет на некоторое расстояние далее внутрь барьера.

К сожалению, приближение ВКБ нельзя использовать в области вблизи точки $x = a$, так как при $E = V$ условия его применимости нарушаются (см. уравнения (12.4)). Таким образом, если, например, исходить из такого решения

$$\psi \sim \frac{1}{\sqrt{p_1}} \exp \left(- \int_a^x p_1 \frac{dx}{\hbar} \right) \quad (\text{с } p_1 = \sqrt{2m(V-E)}),$$

которое является хорошим приближением к точным решениям на некотором расстоянии вправо от точки $x = a$, то на достаточном

расстоянии влево от точки $x=a$ приближенное решение (это все, что мы знаем) будет иметь вид

$$\psi \sim \frac{A}{\sqrt{p_2}} \exp \left(i \int_a^x p_2 \frac{dx}{\hbar} \right) + \frac{B}{\sqrt{p_2}} \exp \left(-i \int_a^x p_2 \frac{dx}{\hbar} \right),$$

где A и B — неизвестные постоянные и $p_2 = \sqrt{2m(E-V)}$. Значения A и B не могут быть найдены с помощью только лишь приближения ВКБ, так как они определяются характером решения в области, где неприменимо это приближение. Чтобы получить значения A и B , нужно знать решение в области вблизи точки $x=a$. В общем случае это очень сложная задача, которая решается численными методами. Однако если приближение ВКБ применимо на некотором расстоянии от точки $x=a$, то нужно только найти лучшее решение для малой области вблизи точки $x=a$ и распространить его на область, где справедливо приближение ВКБ. Если область вблизи $x=a$ достаточно мала, то потенциальную функцию внутри нее можно приближенно представить прямой линией с наклоном, равным наклону потенциальной кривой в классической точке поворота $x=a$. Так как $E=V$ в точке $x=a$, то можно записать

$$V - E = C(x - a),$$

где C — постоянная, равная $\left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)_{x=a}$. Таким образом, в этой области уравнение Шрёдингера приближенно сводится к следующему:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + C(x - a)\psi = 0. \quad (12.38)$$

Это уравнение еще весьма сложно для решения, оно может быть решено с помощью бесселевых функций порядка $1/3$. После того, как оно решено, нужно распространить решение достаточно далеко от точки $x=a$, где становится применимым приближение ВКБ, и затем сожмнуть решение в каждой области с соответствующим приближением ВКБ. Таким путем могут быть определены постоянные A и B . Мы не будем здесь вдаваться в детали этой процедуры, а только сошлемся на результаты (см. [29], описание различных методов дано в [30], стр. 95).

9. Формулы связи.

Случай А: потенциальный барьер — справа.

Предположим, что $V > E$ справа от точки $x=a$ и пусть $p_2 = \sqrt{2m(E-V)}$, $p_1 = \sqrt{2m(V-E)}$. Далее, для точки, достаточно удаленной от $x=a$, в этой области рассмотрим приближенное

решение в виде убывающей экспоненциальной функции, а именно

$$\psi_1 \cong \frac{1}{\sqrt{p_1}} \exp \left(- \int_a^x p_1 \frac{dx}{\hbar} \right). \quad (12.39a)$$

Достаточно далеко слева от точки $x=a$ формула связи устанавливает, что это решение стремится к

$$\psi_2 \cong \frac{2}{\sqrt{p_2}} \cos \left(\int_x^a p_2 \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (12.39b)$$

Аналогично для решения, возрастающего экспоненциально справа от точки $x=a$, можно показать, что существует следующая связь:

$$\frac{1}{\sqrt{p_2}} \sin \left(\int_x^a p_2 \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) \longleftrightarrow - \frac{1}{\sqrt{p_1}} \exp \left(\int_a^x p_1 \frac{dx}{\hbar} \right). \quad (12.40)$$

Случай Б: потенциальный барьер — слева.

Удобно записываются формулы для случая, когда классически запретная область лежит слева от точки $x=a$.

Для решения, убывающего экспоненциально слева от точки $x=a$, мы найдем следующую формулу связи:

$$\frac{1}{\sqrt{p_1}} \exp \left(- \int_x^a p_1 \frac{dx}{\hbar} \right) \longleftrightarrow \frac{2}{\sqrt{p_2}} \cos \left(\int_a^x p_2 \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (12.41)$$

Если волновая функция возрастает экспоненциально слева от точки $x=a$, то

$$\frac{1}{\sqrt{p_2}} \sin \left(\int_a^x p_2 \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) \longleftrightarrow - \frac{1}{\sqrt{p_1}} \exp \left(\int_x^a p_1 \frac{dx}{\hbar} \right). \quad (12.42)$$

Следует отметить, что решение в области, где $x < a$, не является простым продолжением решения в области $x > a$. Например,

продолжением функции $\frac{1}{\sqrt{p_2}} \exp \left(- \int_a^x p_2 \frac{dx}{\hbar} \right)$ является функция

$\frac{1}{\sqrt{p_2}} \exp \left(- i \int_a^x p_2 \frac{dx}{\hbar} \right)$, в то время как фактическое решение в области $x < a$ содержит множитель

$$\cos \left(\int_a^x p \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right),$$

т. е. имеет вид двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях.

Нужно также заметить, что формулы связи способны нам дать только соотношение между решениями для областей, лежащих на некоторых расстояниях справа и слева от точки возврата $x = a$. Для получения формы волновой функции в промежуточной области нужно обратиться к точному решению, которое включает бесселевы функции порядка $1/3$. Однако для практических целей в большинстве случаев несущественно знание точной формы решения в промежуточной области, единственное, что требуется знать, это — формулы связи.

Точные математические условия, при которых можно строго доказать формулы связи, чрезвычайно сложны*). Мы ограничимся здесь утверждением, что для всех практических случаев, которые когда-либо встретятся нам, выполняются следующие требования:

1) Должны существовать области с той и другой стороны от точки возврата, содержащие много длин волн, в которых применимо приближение ВКБ.

2) В области около точки возврата (при $x = a$), в которой неприменимо приближение ВКБ, кинетическую энергию можно приближенно представить прямой линией $E - V = C(x - a)$. Иными словами, потенциал не должен претерпевать больших относительных изменений в наклоне внутри этой области. Область, в которой приближение ВКБ неприменимо, должна распространяться по крайней мере до первого узла волновой функции или, что еще лучше, содержать несколько первых колебаний. Внутри потенциального барьера приближение ВКБ станет применимым, после того как

интеграл $\int_a^x \sqrt{2m(V - E)} \frac{dx}{\hbar}$

станет заметно больше единицы.

Существуют два типа задач, в которых формулы связи нарушаются. Первый из них соответствует случаю, когда энергия частицы такова, что ее классическая точка возврата находится вблизи вершины барьера, где наклон потенциала мал. В результате линейная аппроксимация для потенциала нарушается, и формулы связи должны быть изменены (подробнее об этом см. [30], стр. 103—112). Такой потенциал показан на рис. 49. Для энергий, достаточно близких к вершине барьера, формулы связи

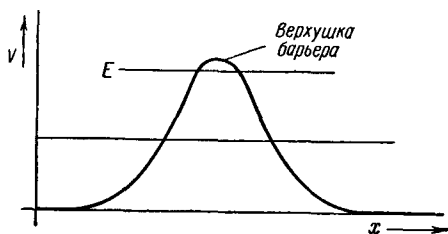


Рис. 49.

врата находится вблизи вершины барьера, где наклон потенциала мал. В результате линейная аппроксимация для потенциала нарушается, и формулы связи должны быть изменены (подробнее об этом см. [30], стр. 103—112). Такой потенциал показан на рис. 49. Для энергий, достаточно близких к вершине барьера, формулы связи

*) Детально эти условия рассмотрены в [30], стр. 103—112.

несправедливы. Но для более низких энергий они справедливы, так как потенциал можно приближенно представить прямой линией.

Задачи второго типа возникают, когда наклон потенциала изменяется очень быстро, например в случае прямоугольной потенциальной ямы. Для такого потенциала наклон везде равен нулю, кроме точек разрыва, где он равен бесконечности. Формулы связи также нарушаются и для потенциала типа, показанного на рис. 50. Чтобы



Рис. 50.

решить эту задачу, нужно использовать точное решение волнового уравнения в каждой области и «сшить» эти решения на границах этих областей.

Здесь уместно сделать несколько замечаний о направлениях стрелки в формулах связи. Строго говоря, стрелка должна указывать только направление, в котором возрастает вещественная экспоненциальная функция. Причиной этого является то, что ввиду некоторой недостаточности приближения ВКБ всегда есть возможность ввести наряду с любым данным решением некоторое другое решение. Если мы связаны с направлением возрастания экспоненциальной функции, то другое решение экспоненциально убывает в этом направлении, и поэтому оно приводит к малой поправке в волновой функции. С другой стороны, если мы связаны с направлением убывания экспоненциальной функции, то другое решение будет экспоненциально возрастать и может поэтому стать много больше, чем убывающее решение, даже если коэффициент, на который оно умножается, очень мал. Однако можно легко показать, что при определении энергетических уровней (виртуальных или фактических) этот эффект приводит к очень малой ошибке, поэтому обычно можно ставить стрелки в обоих направлениях, хотя строгое доказательство этого и может представлять некоторые трудности. Однако если для заданной энергии желательно очень точно узнать волновую функцию, то можно ставить стрелку только в направлении возрастания вещественного экспоненциала.

10. Вероятность проникновения через барьер. Проникновение через потенциальный барьер является одной из наиболее важных задач, к которым применяются формулы связи. Если приближение ВКБ справедливо внутри барьера, то потенциальная функция не должна изменяться слишком быстро. Формулы связи применимы, когда барьер

достаточно широк и высок, так что интеграл $\int_b^a \sqrt{2m(V-E)} \frac{dx}{\hbar}$

заметно больше единицы. Если эти условия выполняются, то легко можно подсчитать вероятность проникновения через барьер.

Для потенциального барьера, изображенного на рис. 51, энергия частицы такова, что точки возврата находятся при $x=a$ и $x=b$. Предположим, что частицы падают на барьер слева. Некоторые из них отражаются, а некоторые проходят через барьер. Поэтому справа (в области III) имеется только прошедшая волна. Ее можно представить формулой

$$\psi_{III} \sim \frac{A}{\sqrt{p}} \exp \left(i \int_a^x p \frac{dx}{\hbar} - i \frac{\pi}{4} \right), \quad (12.43a)$$

где

$$p = \sqrt{2m(E - V)}.$$

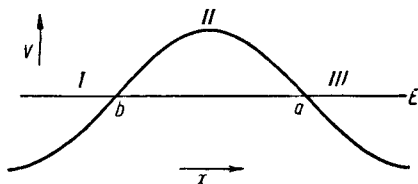


Рис. 51.

Фаза $-\pi/4$ включена в показатель экспоненты из соображений удобства использования формул связи. Так как коэффициент A комплексный, то такая фаза может быть включена в него. Чтобы иметь возможность применить формулу связи, прежде всего запишем

$$\psi_{III} \cong \frac{A}{\sqrt{p}} \left[\cos \left(\int_a^x p \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) + i \sin \left(\int_a^x p \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) \right]. \quad (12.43b)$$

Применим теперь формулу связи для случая, когда барьер находится слева, и получим

$$\psi_{II} \cong \frac{A}{\sqrt{p_1}} \left[\frac{1}{2} \exp \left(- \int_x^a p_1 \frac{dx}{\hbar} \right) - i \exp \left(\int_x^a p_1 \frac{dx}{\hbar} \right) \right],$$

где

$$p_1 = \sqrt{2m(V - E)}. \quad (12.44a)$$

Нахождение волновых функций в области I является следующим шагом в применении формул связи. В этой области потенциальный барьер находится справа. Поэтому прежде всего нужно привести ψ_{II} к виду, удобному для применения формул связи в данном случае:

$$\begin{aligned} \psi_{II} \cong \frac{A}{\sqrt{p_1}} \left[\frac{1}{2} \exp \left(- \int_b^a p_1 \frac{dx}{\hbar} + \int_b^x p_1 \frac{dx}{\hbar} \right) - \right. \\ \left. - i \exp \left(\int_b^a p_1 \frac{dx}{\hbar} - \int_b^x p_1 \frac{dx}{\hbar} \right) \right]. \quad (12.44b) \end{aligned}$$

Уравнения (12.396) и (12.40) тогда дают

$$\psi_1 \cong -\frac{A}{\sqrt{p}} \left[\frac{1}{2} \exp \left(-\int_b^a p_1 \frac{dx}{h} \right) \sin \left(\int_x^b p \frac{dx}{h} - \frac{\pi}{4} \right) + \right. \\ \left. + 2i \exp \left(\int_b^a p_1 \frac{dx}{h} \right) \cos \left(\int_x^b p \frac{dx}{h} - \frac{\pi}{4} \right) \right], \quad (12.45a)$$

или

$$\psi_1 \cong -\frac{iA}{\sqrt{p}} \left\{ \exp \left[-i \left(\int_b^x p \frac{dx}{h} + \frac{\pi}{4} \right) \right] \times \right. \\ \times \left[\exp \left(\int_b^a p_1 \frac{dx}{h} \right) - \frac{1}{4} \exp \left(-\int_b^a p_1 \frac{dx}{h} \right) \right] + \exp \left[i \left(\int_b^x p \frac{dx}{h} + \frac{\pi}{4} \right) \right] \times \\ \left. \times \left[\exp \left(\int_b^a p_1 \frac{dx}{h} \right) + \frac{1}{4} \exp \left(-\int_b^a p_1 \frac{dx}{h} \right) \right] \right\}. \quad (12.45b)$$

Коэффициент прозрачности точно равен отношению произведения интенсивности прошедшей через барьер волны на скорость прошедших частиц к произведению интенсивности падающей волны на скорость падающих частиц. Заметив, что отношение скоростей равно отношению импульсов, получим

$$T = \left[\exp \left(\int_b^a p_1 \frac{dx}{h} \right) + \frac{1}{4} \exp \left(-\int_b^a p_1 \frac{dx}{h} \right) \right]^{-2}. \quad (12.46a)$$

Если приближение ВКБ применимо, то $\int_b^a p_1 \frac{dx}{h} \gg 1$, т. е. членом с отрицательным показателем экспоненты можно пренебречь в сравнении с положительным. Это дает

$$T \cong \exp \left(-2 \int_b^a p_1 \frac{dx}{h} \right). \quad (12.46b)$$

Мы видим, что за исключением некоторых множителей, весьма близких по величине к единице, этот результат совершенно такой же, как и в случае прямоугольного барьера (см. уравнение (11.34)),

для которого $\int_b^a p_1 \frac{dx}{h} = (b-a) \frac{p_1}{h}$. Однако, когда высота барьера

переменная, необходимо производить интегрирование, как это указано выше.

Задача 3. Доказать, что сумма коэффициента прозрачности и коэффициента отражения равна единице.

Задача 4. Вычислить ток в областях *I*, *II*, *III* и показать, что он одинаков во всех трех областях, т. е. имеет место сохранение вероятности. Почему существует ток в области *II*, даже когда волновая функция не осциллирует?

11. Использование выражения для вероятности проникновения через барьер в частных случаях.

1) *Холодная эмиссия электронов из металлов.* Электроны внутри металла движутся в поле с более или менее постоянным потенциалом, но когда они достигают границ металла, то притягиваются обратно в металл с потенциальной энергией порядка от 5 до 10 эв. Сила, толкающая электрон обратно в металл, является результатом действия «воображаемого» заряда, индуцирующегося в металле, когда электрон покидает его поверхность. Большая часть силы действует на очень коротком расстоянии от границы металла, вероятно, на расстоянии одного или двух атомных диаметров (от 3 до $5 \cdot 10^{-8}$ см). Потенциальная функция приближенно имеет вид, изображенный на рис. 52. Энергия W , необходимая для освобождения электрона из металла, называется *работой выхода*.

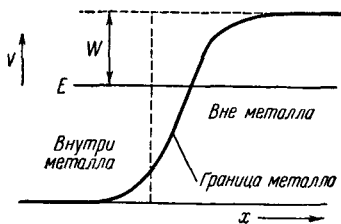


Рис. 52.

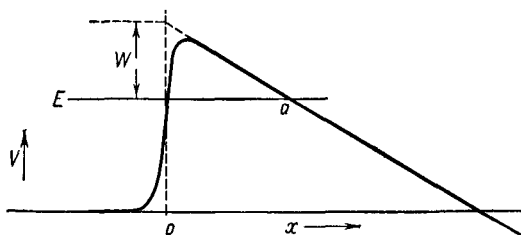


Рис. 53.

Пусть металл помещен в сильное электрическое поле, направленное таким образом, что оно стремится вырвать электрон из металла. Тогда потенциальная функция представится кривой, подобной той, которая изображена на рис. 53, так как к первоначальному потенциалу добавляется электрический потенциал $-e\mathcal{E}x$, где $\mathcal{E}$ — электрическое поле и x — расстояние от поверхности металла. Таким образом, здесь всегда будет такое положение: $x=a$, в котором

электрон обладает положительной кинетической энергией, даже находясь вне металла, и будет существовать определенная вероятность, что он просочится сквозь потенциальный барьер и покинет металл навсегда. Этот процесс называется *холодной эмиссией* в противоположность термической эмиссии, которая имеет место, когда электрон приобретает энергию, достаточную для преодоления барьера, в силу беспорядочного теплового движения.

Для вычисления коэффициента прозрачности нужно знать, как изменяется V в области, близкой к поверхности металла. Так как расстояние a обычно значительно больше атомных размеров, то влияние на результат расчета области, в которой потенциальная функция криволинейна (вблизи точки $x=0$), будет мало по сравнению с влиянием остальной области потенциального барьера между точками $x=0$ и $x=a$. Это означает, что точный вид криволинейного участка потенциала не очень существен, и мы можем приближенно представить потенциал по всей области от $x=0$ до $x=a$ прямой линией $V=-e\mathcal{E}x$. Хотя приближение ВКБ может быть нарушено в области вблизи точки $x=0$, так как потенциал здесь имеет большую кривизну и резкий спад, однако игнорирование этого также не может внести серьезных ошибок в расчет, потому что доля этой области в множителе, определяющем прозрачность, составляет лишь малую часть всего эффекта. Следовательно, везде можно пользоваться приближением ВКБ и полагать $V-E=W-e\mathcal{E}x$. Из уравнения (12.45б) тогда получим (замечая, что $W-e\mathcal{E}x=0$ при $x=a$)

$$T = \exp \left[-2 \int_0^a \sqrt{2m(W-e\mathcal{E}x)} \frac{dx}{\hbar} \right] = \exp \left[-\frac{4}{3} \sqrt{2m} \frac{W^{3/2}}{\hbar e\mathcal{E}} \right]. \quad (12.47)$$

Зная коэффициент прозрачности, можно вычислить ток, умножая T на число электронов, ударяющихся за 1 сек о поверхность металла. Мы видим, что ток должен быстро расти с возрастанием напряженности поля и должен также быть наибольшим для веществ с наименьшей работой выхода W . Это и наблюдается экспериментально. Однако наблюдается некоторое расхождение между опытом и теорией, а именно, определяемые экспериментально токи значительно больше токов, рассчитанных по формуле (12.47). Это расхождение вызвано тем, что поверхность металла не плоская, а обладает микроскопическими неровностями, которые создают у поверхности металла более сильное электрическое поле, чем поле на значительном удалении от нее. Так как T очень чувствительно к величине силы поля $\mathcal{E}$, то резкое возрастание тока может иметь место, даже когда $\mathcal{E}$ у поверхности увеличивается всего в два или три раза.

2) *Радиоактивный распад*. Мы уже указывали, что заряженная частица, такая как протон или α -частица, связана в атомных ядрах

громкими силами притяжения, которые имеют очень короткий радиус действия (см. гл. 11, п. 3). Когда частица покидает ядро, то она отталкивается кулоновской силой (см. гл. 11, п. 6). В результате потенциальная энергия имеет вид потенциальной ямы с отталкивающим барьером по краям, как это показано на рис. 39. Поэтому частица может находиться внутри ядра длительное время, даже обладая положительной энергией при условии, что эта энергия меньше максимальной высоты барьера. Среднее время жизни по отношению к эмиссии частицы приведено в гл. 11, п. 6 и равно $\tau = 10^{-21} T$ сек, где T — коэффициент прозрачности барьера. Для вычисления T мы будем пользоваться приближением ВКБ*). Если ядро имеет заряд Ze , то α -частица с зарядом $2e$ отталкивается электростатически с энергией $V = 2(Z - 2)e^2/r$. Чтобы воспользоваться приближением ВКБ, мы должны были бы точно знать, как искривляется потенциал вблизи точки $r = r_0$. Но так как ядерные силы практически исчезают на расстояниях, значительно меньших, чем $r_1 - r_0$, то можно, как и в случае холодной эмиссии электронов, рассматривать только электростатическую энергию и считать r_0 равным радиусу ядра. Для r_0 можно пользоваться формулой

$$r_0 = 2 \cdot 10^{-13} Z^{1/3} \text{ см},$$

которая была получена независимыми методами ([31], стр. 220 или стр. 168 перевода).

Найдем теперь коэффициент T . Имеем

$$T = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{2m \left[2(Z - 2) \frac{e^2}{r} - E \right]} dr \right\}, \quad (12.48)$$

где r_1 — точка, для которой

$$E = 2(Z - 2) \frac{e^2}{r_1} \quad \text{или} \quad r_1 = 2(Z - 2) \frac{e^2}{E}.$$

Интеграл в показателе может быть упрощен при помощи замены

$$\begin{aligned} U &= \sqrt{\frac{r_1}{r} - 1}, \quad r = \frac{r_1}{1 + U^2}, \quad v = \sqrt{\frac{2E}{m}}, \\ 2 \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{2m \left[2(Z - 2) \frac{e^2}{r} - E \right]} \frac{dr}{\hbar} &= \frac{4r_1 v m}{\hbar} \int_0^{\sqrt{\frac{r_1}{r_0} - 1}} \frac{U^2 dU}{(1 + U^2)^2} = \\ &= \frac{2v r_1 m}{\hbar} \left(\operatorname{arctg} U - \frac{U}{1 + U^2} \right) \sqrt{\frac{r_1}{r_0} - 1}. \quad (12.49) \end{aligned}$$

*) Фактически задача здесь трехмерная, но, как и в случае дейтрона (см. гл. 11, п. 14), форма волнового уравнения остается той же, как и в одномерном случае.

Обозначим $\frac{r_0}{r_1} = \cos^2 W$ и $\sqrt{\frac{r_1}{r_0} - 1} = \operatorname{tg} W$. Тогда получим (исключая r_1 из E)

$$T = \exp \left[-4 \frac{(Z-2)e^2}{\hbar v} (2W - \sin 2W) \right]. \quad (12.50)$$

Задача 5. Вычислить время жизни α -частиц урана (рассмотреть энергию α -частиц). Сравнить с результатами для α -частицы полония. Вывести, насколько чувствительно время жизни к энергии. Сравнить результаты с наблюдаемыми величинами и объяснить, какие могут быть разногласия между теорией и опытом.

12. Вероятность проникновения частиц внутрь ядра. Если очень быстрые заряженные частицы, такие, как протоны или α -частицы, падают на ядро, то они, вообще говоря, могут проникнуть в него. Однако при этом или их энергия должна быть достаточна, чтобы пройти над потенциальным барьером, или они должны «просочиться» через него описанным выше способом. Поскольку ядро является трехмерным образованием, то вышеприведенные формулы, строго говоря, к нему неприменимы. Все же на основании этих расчетов можно предполагать существование двух условий, определяющих вероятность проникновения внутрь ядра заряженной частицы, энергия которой недостаточна для того, чтобы перескочить через барьер.

1) Частица должна иметь с ядром совершенно прямое соударение, т. е. частица не должна ударяться в направлении, при котором она «скользнет» по ядру.

2) Частица должна проникнуть сквозь барьер.

Если известна площадь ядра, то вероятность соударения с ядром может быть оценена теми же методами, которыми пользуются в кинетической теории для оценки длины свободного пробега газовых молекул (см. гл. 21, п. 3, а также [32], стр. 97—126). Если N — число молекул в 1 см^3 , A — площадь поперечного сечения ядра, то на пути $l \text{ см}$, лежащем внутри вещества, вероятность такого соударения равна $P = NAl$.

Вероятность проникновения равна произведению P на коэффициент прозрачности барьера T . Для протонов потенциальная энергия вычисляется по формуле $V = Ze^2/r$. Отсюда имеем $r_1 = Ze^2/E$ и

$$T = \exp \left[-\frac{2Ze^2}{\hbar v} (2W - \sin W) \right], \quad (12.51)$$

где

$$\cos^2 W = \frac{r_0}{r_1}.$$

Задача 6. Определить для ядра с $Z = 92$ коэффициенты прозрачности при проникновении внутрь ядра протонов с энергией 3 и 8 Мэв.

Найдено, что приближение ВКБ дает достаточно хорошее согласие с экспериментом при определении зависимости прозрачности

барьера от величин Z и W , но из него не следует правильная оценка точной величины численного множителя перед показателем экспоненты в выражении для T . Отсутствие точного согласия с опытом неудивительно, потому что, во-первых, неизвестна точная форма потенциала у границы ядра, во-вторых, точно неизвестно, что происходит внутри ядра, и, в-третьих, само приближение ВКБ, вероятно, неприменимо в малой области вблизи края ядра, где потенциал довольно резко искривляется. Все же основные черты изменения обусловлены кулоновским барьером, который продолжается далеко от границы ядра и который достаточно точно учитывается в принятой нами трактовке описываемого явления. Однако для более точной теории нужно иметь более детальные сведения о том, что происходит внутри ядра и на его границах.

13. Связанные состояния потенциальной ямы. Рассмотрим теперь задачу потенциальной ямы в приближении ВКБ. Такая яма может быть представлена кривой, показанной рис. 54.

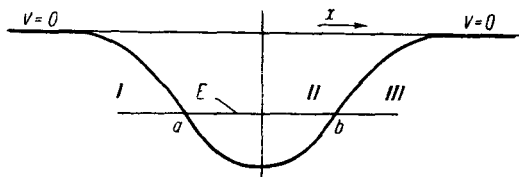


Рис. 54.

При $E < 0$, согласно классической теории, частица будет колебаться на отрезке оси x между точками $x=a$ и $x=b$, где кинетическая энергия равна нулю. Период колебаний зависит от формы потенциала и от положения пределов колебаний, последние же зависят от величины энергии. Такие колебания будут негармоническими. Система представляет гармонический осциллятор, если только существует параболическая зависимость потенциала от x : $V = kx^2/2$. Мы видели в (2.12), что период колебаний дается формулой

$$\tau = \frac{\partial J}{\partial E},$$

где

$$J = \oint p dq = 2 \int_a^b \sqrt{2m(E - V)} dx.$$

Решение для волновой функции. Определим теперь волновые функции для этого потенциала, используя приближение ВКБ.

Мы знаем, что, согласно квантовой теории, волновая функция экспоненциально проникает в область, где $V > E$. Начнем

рассмотрение с области I , где $x < a$. Нужно выбрать решение, убывающее экспоненциально влево:

$$\psi_I = \frac{A}{\sqrt{p_1}} \exp\left(-\int_x^a p_1 \frac{dx}{\hbar}\right),$$

где

$$p_1 = \sqrt{2m(V-E)}.$$

Формула связи для случая, когда барьер слева (уравнение (12.41)), дает такое выражение для волновой функции внутри ямы:

$$\psi_{II} = \frac{2A}{\sqrt{p}} \cos\left(\int_a^x p \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{2A}{\sqrt{p}} \cos\left(\int_x^a p \frac{dx}{\hbar} + \frac{\pi}{4}\right). \quad (12.52)$$

Для определения того, что происходит с волновой функцией в области III , нужно переписать ее в форме, пригодной для использования формул связи в случае барьера, расположенного справа. В результате получим

$$\begin{aligned} \psi_{II} &= \frac{2A}{\sqrt{p}} \cos\left(\int_x^b p \frac{dx}{\hbar} - \int_a^b p \frac{dx}{\hbar} + \frac{\pi}{4}\right) = \\ &= \frac{2A}{\sqrt{p}} \cos\left(\int_x^b p \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} - \int_a^b p \frac{dx}{\hbar} + \frac{\pi}{2}\right). \end{aligned} \quad (12.53)$$

В области III решение должно экспоненциально убывать. Применим уравнение (12.396) для случая, когда барьер расположен справа. При этом формулы связи будут по-прежнему справедливыми, если только их умножить на -1 . Поэтому экспоненциальное убывание получится, если только фаза тригонометрической функции в ψ_{II}

такова, что последняя имеет вид $\cos\left(\int_x^b p \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right)$. Легко видеть,

что это условие выполняется в том и только в том случае, если удовлетворяется равенство

$$\int_a^b p \frac{dx}{\hbar} = \left(N + \frac{1}{2}\right) \pi, \quad (12.54)$$

где N — любое целое число. Используя формулу

$$J = \oint p dq = 2 \int_a^b p dx,$$

мы получим в этом случае

$$J = \left(N + \frac{1}{2}\right)h, \quad (12.55)$$

где опять N — любое целое число. Формула (12.55) совпадает с квантовым условием Бора — Зоммерфельда (см. гл. 2, п. 12) с точностью до слагаемого $1/2$ у N . Таким образом, волновая теория в классическом предельном случае приводит к старым квантовым условиям. О поправке в виде слагаемого $1/2$ уже догадывались и до появления волновой теории, так как она была необходима для того, чтобы получить согласие между теорией и опытом при определении энергетических уровней.

Вид волновой функции. Формулы связи указывают на то, что волновая функция должна в точках поворота $x=a$ и $x=b$ иметь соответственно фазы $N\pi + \pi/4$ и $N\pi - \pi/4$, где N — некоторое целое число. В действительности приближение ВКБ не справедливо в этой области, но приближенно фазы волновой функции, рассчитанной по методу ВКБ, будут близки к своим истинным значениям. Тогда волновая функция с $N=0$ имеет фазу $\pi/4$ в точке $x=a$ и $-\pi/4$ в точке $x=b$. Поэтому для наинизшего состояния только четверть длины волны попадает внутрь области с положительной кинетической энергией (волновая функция имеет вид кривой, изображенной на рис. 55). Это есть следствие существования полуцелого квантового числа. Наинизшее состояние не имеет узлов.

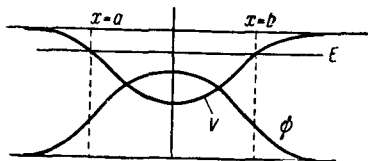


Рис. 55.

Первое возбужденное состояние осциллятора имеет один узел, следующее — два и т. д. Поэтому и в приближении ВКБ, так же как и в случае прямоугольной ямы, возможна классификация связанных состояний по числу узлов (см. гл. 11, п. 12.) Действительно, эта классификация пригодна для любого вида потенциальной функции, т. е. *номер квантового состояния равен числу узлов волновой функции.*

Можно показать, что если формулы связи неприменимы, то квантовые условия могут быть несколько изменены. Например, для очень глубокой потенциальной ямы волновая функция исчезает в точках поворота, и мы должны уместить целое число полуволин внутри ямы. В этом случае вместо (12.55) получим соотношение $J = (N + 1)h$. Появление множителя $N + 1/2$ в приближении ВКБ вызвано тем, что волна может проникать экспоненциально в классически недоступную область. Иными словами, она распространяется на несколько большую область, чем для бесконечно высокого барьера. В результате

необходима только четверть длины волны для заполнения классически доступной области, вместо половины длины волны, которая необходима для этого в яме с бесконечно высокими барьерами. С другой стороны, в очень мелких ямах точки поворота могут находиться в области, где кривизна потенциала может заметно сказываться на расстояниях порядка длины волны, так что здесь формулы связи делаются неприменимыми и фаза волны в точке поворота изменяется (см. п. 8). Квантовые условия для такого случая становятся более сложными, и здесь мы не будем их рассматривать.

Задача 7. Применить вышеприведенные рассуждения для вычисления энергетических уровней гармонического осциллятора и получить результат $E = (n + 1/2) h\nu$. Обратить внимание на тот факт, что наинизший энергетический уровень равен $E = h\nu/2$, а не $E = 0$, как это давала старая теория Бора — Зоммерфельда (см. гл. 2, п. 12). Объяснить этот факт с помощью соотношения неопределенностей.

Изобразить схематически волновые функции в приближении ВКБ для первых четырех квантовых состояний.

14. Виртуальные, или метастабильные, состояния в приближении ВКБ. Если потенциальная яма окружена барьером (как для заряженных частиц в ядре), то кроме истинных связанных состояний

могут существовать еще и виртуальные, или метастабильные связанные состояния. Их существование возможно вследствие того, что электронная волна с положительной энергией может многократно отражаться от барьера, окружающего яму, прежде чем она проникнет сквозь него. Такой случай изображен, например, на рис. 56. Для простоты будем считать, что потенциал симметричен относительно точки $x = 0$, хотя это несущественно. Точки поворота будут при значениях координаты x , равной a , b , $-a$ и $-b$.

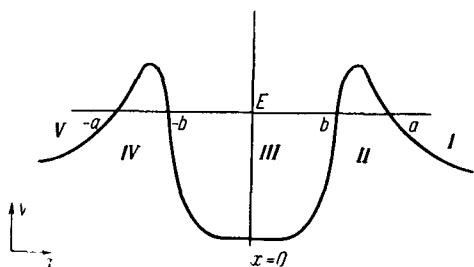


Рис. 56.

могут существовать еще и виртуальные, или метастабильные связанные состояния. Их существование возможно вследствие того, что электронная волна с положительной энергией может многократно отражаться от барьера, окружающего яму, прежде чем она проникнет сквозь него. Такой случай изображен, например, на рис. 56. Для простоты будем считать, что потенциал симметричен относительно точки $x = 0$, хотя это несущественно. Точки поворота будут при значениях координаты x , равной a , b , $-a$ и $-b$.

Эта задача будет очень напоминать уже рассмотренную выше задачу о метастабильных состояниях в прямоугольной потенциальной яме без барьеров (см. гл. 11, п. 20), но здесь метастабильные состояния будут обладать значительно большим временем жизни, так как прозрачность барьера в общем случае значительно меньше, чем прозрачность острого края потенциала прямоугольной ямы.

Как и в случае прямоугольной ямы, предположим, что поток частиц падает слева. Некоторые из них будут отражены, некоторые — пройдут через барьер. Однако справа от точки $x = a$ будет нахо-

даться только пропущенная волна, поэтому для области I будем иметь

$$\psi_I = \frac{A}{\sqrt{p}} \exp \left(i \int_a^x p \frac{dx}{\hbar} - i \frac{\pi}{4} \right). \quad (12.56)$$

Задача определения волновой функции в областях II и III точно такая же, как и в рассмотренном выше случае проникновения частиц через потенциальный барьер. Из уравнения (12.45) тогда получим

$$\begin{aligned} \psi_{III} = -\frac{A}{\sqrt{p_w}} & \left[\frac{1}{2} e^{-\int_b^a p_1 \frac{dx}{\hbar}} \sin \left(\int_x^b p_w \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) + \right. \\ & \left. + 2i e^{\int_b^a p_1 \frac{dx}{\hbar}} \cos \left(\int_x^b p_w \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) \right], \quad (12.57a) \end{aligned}$$

где p_w — абсолютная величина импульса внутри ямы. Это решение должно быть теперь продолжено через яму в область IV с помощью формул связи. Чтобы воспользоваться этими формулами, прежде всего преобразуем аргументы тригонометрических функций. Для этого используем такое преобразование:

$$\int_x^b p_w \frac{dx}{\hbar} = -\int_b^x p_w \frac{dx}{\hbar} = -\left(\int_b^{-b} p_w \frac{dx}{\hbar} + \int_{-b}^x p_w \frac{dx}{\hbar} \right) \quad (12.576)$$

и введем обозначения $\int_{-b}^b p_w dx = \frac{J}{2}$, где J — переменная действия, и

$$\exp \left(\int_b^a p_1 \frac{dx}{\hbar} \right) = \Theta;$$

в результате получим

$$\begin{aligned} \psi_{III} = \frac{A}{\sqrt{p_w}} & \left\{ -2i\Theta \cos \left[\int_{-b}^x p_w \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} + \left(\frac{\pi}{2} - \frac{J}{2\hbar} \right) \right] + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2\Theta} \sin \left[\int_{-b}^x p_w \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} + \left(\frac{\pi}{2} - \frac{J}{2\hbar} \right) \right] \right\}. \quad (12.53) \end{aligned}$$

Произведя теперь элементарные тригонометрические преобразования, имеем

$$\begin{aligned} \psi_{III} = \frac{A}{\sqrt{p_w}} \left\{ \cos \left(\int_{-b}^x p_w \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) \left[-2i\Theta \cos \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{2\Theta} \sin \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right] + \sin \left(\int_{-b}^x p_w \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) \times \right. \\ \left. \times \left[2i\Theta \sin \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) + \frac{1}{2\Theta} \cos \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right] \right\}. \quad (12.59) \end{aligned}$$

Следующим шагом является определение решения для области IV. Воспользуемся формулами связи для случая, когда барьер расположен

слева. Так как $-\int_x^{-b} = \int_{-a}^x - \int_{-a}^{-b}$ и $\Theta = \exp \left(\int_{-a}^{-b} p_1 \frac{dx}{\hbar} \right)$, то получим

$$\begin{aligned} \psi_{IV} = \frac{A}{\sqrt{p_1}} \left\{ \exp \left(\int_{-a}^x p_1 \frac{dx}{\hbar} \right) \left[-i \cos \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) + \frac{1}{4\Theta^2} \sin \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right] - \right. \\ \left. - \exp \left(- \int_{-a}^x p_1 \frac{dx}{\hbar} \right) \left[2i\Theta^2 \sin \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) + \frac{1}{2} \cos \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right] \right\}. \quad (12.60) \end{aligned}$$

Наконец необходимо определить волновую функцию в области V. Используем формулы (12.39б) и (12.40) для случая, когда барьер расположен справа, это дает

$$\begin{aligned} \psi_V = \frac{-A}{\sqrt{p}} \left\{ \sin \left(\int_x^{-a} p \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) \left[-i \cos \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) + \frac{1}{4\Theta^2} \sin \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right] + \right. \\ \left. + \cos \left(\int_x^{-a} p \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) \left[4i\Theta^2 \sin \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) + \cos \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right] \right\}. \quad (12.61) \end{aligned}$$

Перепишем теперь формулу (12.61), введя экспоненциальные функции:

$$\begin{aligned} \psi_V = \frac{-A}{2\sqrt{p}} \left\{ \exp \left[i \int_{-a}^x p \frac{dx}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right] \times \right. \\ \times \left[2 \cos \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) + i \left(4\Theta^2 + \frac{1}{4\Theta^2} \right) \sin \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right] + \\ \left. + i \exp \left[-i \left(\int_{-a}^x p \frac{dx}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right) \right] \left(4\Theta^2 - \frac{1}{4\Theta^2} \right) \sin \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right\}. \quad (12.62) \end{aligned}$$

Мы видим, что ψ_V включает как падающую, так и отраженную волны. Коэффициент прозрачности T равен отношению интенсивностей прошедшей и отраженной волн

$$T = 4 \left[4 \cos^2 \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) + \left(4\Theta^2 + \frac{1}{4\Theta^2} \right)^2 \sin^2 \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right]^{-1}. \quad (12.63)$$

Производя замену $\cos^2(\) = 1 - \sin^2(\)$, получим окончательно

$$T = \left[1 + \frac{1}{4} \left(4\Theta^2 - \frac{1}{4\Theta^2} \right)^2 \sin^2 \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right]^{-1}. \quad (12.64)$$

Задача 8. Доказать, что $T + R = 1$.

15. Обсуждение выражения (12.64) для коэффициента прозрачности. Приближение ВКБ должно применяться только в случае высоких и широких барьеров, когда Θ велико, а T обычно очень мало. Сравним эти результаты с теми, которые получены для прямоугольной потенциальной ямы без барьеров (уравнение (11.34)). По-

скольку величина Θ^2 , равная $\exp \left(2 \int_b^a \frac{p_2 dx}{\hbar} \right)$, обычно значительно

больше отношения p_2/p_1 , то коэффициент прозрачности в этом случае, вообще говоря, значительно меньше, чем T для прямоугольной ямы в случае сил притяжения. Все же, так же как и в случае прямоугольной ямы, имеются точки, для которых T равно 1. Такой резонанс прозрачности осуществляется при выполнении следующих условий:

$$\pi - \frac{J}{\hbar} = -2N\pi \quad \text{или} \quad J_N = \left(N + \frac{1}{2} \right) \hbar,$$

где $N = 0, 1, 2, \dots$. Интересно, что условия для резонанса прозрачности точно те же, что и для связанного состояния (см. уравнение (12.55)). Мы увидим, что при резонансе прозрачности возникает метастабильный энергетический уровень точно так же, как для прямоугольной потенциальной ямы.

Причина возникновения резонанса прозрачности точно та же, как и в случае прямоугольной ямы (см. гл. 11, пп. 8 и 20), т. е. волны, испытывающие многократные отражения от краев ямы, находятся в фазе с волнами, только что проникшими в яму. Но фаза отраженной волны в этом случае несколько отличается от соответствующей фазы для прямоугольной ямы, так как барьер с медленно изменяющимся потенциалом отражает несколько иначе, чем барьер с резким скачком потенциала. Особенно интересно, что хотя высокий и широкий барьер обладает очень малой прозрачностью, два таких последовательно расположенных барьера могут быть совершенно прозрачны для определенных длин волн. Такое поведение может быть понято только с помощью волновых представлений о структуре материи. Высокая прозрачность для некоторых длин волн является результатом того, что волны, отраженные изнутри ямы, интерферируя, гасят волны, отраженные от внешней стороны барьера, и поэтому остается только прошедшая волна.

16. Ширина резонанса. Коэффициент прозрачности вблизи резонанса. Около точки резонанса величину J можно разложить в ряд, записав ее в таком виде:

$$J - J_N = \frac{\partial J}{\partial E} \delta E = \tau_0 (E - E_N),$$

где τ_0 — классически рассчитанное время, необходимое частице, чтобы пересечь яму и вернуться назад. Замечая, что вблизи резонанса

$$\sin \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \cong -\frac{1}{2} \tau_0 \frac{(E - E_N)}{\hbar},$$

мы получим из уравнения (12.64) для больших Θ

$$T \cong \frac{1}{1 + \frac{\tau_0^2}{\hbar^2} (E - E_N)^2 \Theta^4}. \quad (12.65a)$$

(Заметим, что эта формула является хорошим приближением только вблизи резонанса.) Из графика зависимости T от E видно, что значения T обычно малы. Они становятся большими только вблизи точек $E = E_N$, как это показано на рис. 57. Полуширину резонансной линии (для $T = 1/2$) получим из условия

$$\Theta^4 (E - E_N)^2 \frac{\tau_0^2}{\hbar^2} = 1 \quad \text{или} \quad E - E_N = \frac{\hbar}{\tau_0 \Theta^2}. \quad (12.65b)$$

Вблизи резонанса прозрачности быстрое возрастание вероятности проникновения через барьер формально весьма напоминает характер

возрастания амплитуды колебаний гармонического осциллятора с учетом затухания под действием вынуждающей силы, частота которой близка к резонансной. Мы позже увидим, что причины резонансных явлений в этих двух задачах аналогичны.

Заметим, что если Θ велико, то резонанс будет очень острым. Острый резонанс при больших Θ обусловлен многократностью отражений. Даже в точке, очень мало удаленной от резонанса, для которой волны испытывают малое изменение фазы при каждом из отражений туда и обратно, волны внутри барьеров в конце концов выходят из фазы с падающей волной в результате накопления изменений фазы при многократных отражениях.

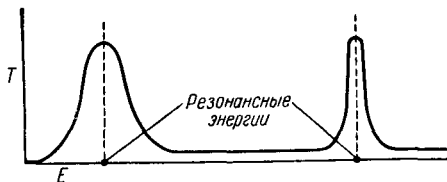


Рис. 57.

17. Интенсивность волны внутри ямы. Интересно рассчитать отношение плотностей вероятности для волны внутри ямы и для падающей волны. Используя уравнения (12.57а) и (12.62), получаем

$$\frac{|\psi_{\text{III}}|^2}{|\psi_{\text{пад}}|^2} = \frac{p}{p_w} \frac{\left[4\Theta^2 \cos^2 \left(\int_x^b p \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) + \frac{1}{4\Theta^2} \sin^2 \left(\int_x^b p \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) \right]}{\left[1 + \frac{1}{4} \left(4\Theta^2 - \frac{1}{4\Theta^2} \right)^2 \sin^2 \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right]}, \quad (12.66)$$

где p_w — импульс в яме, а p — импульс в области V.

Для сильно возбужденных квантовых состояний тригонометрические функции совершают много колебаний внутри ямы. Так как каждое колебание занимает лишь малую часть всей ширины ямы, то удобно рассмотреть среднюю плотность в данной области. Если это сделать, то можно заменить каждую из тригонометрических функций $\cos^2(\)$ и $\sin^2(\)$ на $1/2$. Тогда, предположив, что Θ велико, получим

$$\frac{|\psi_{\text{III}}|^2}{|\psi_{\text{пад}}|^2} = \frac{p}{p_w} \frac{2\Theta^2}{1 + 4\Theta^4 \sin^2 \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right)}. \quad (12.67)$$

Заметим, что вдали от резонанса это отношение обычно мало (при больших Θ), и волновая функция имеет вид, подобный тому, который изображен на рис. 58. Однако при резонансе отношение $|\psi_{\text{III}}|^2/|\psi_{\text{пад}}|^2$ велико, и в результате волновая функция внутри ямы также велика. Так как в этом случае прошедшая волна имеет ту же интенсивность, что и падающая ($T=1$), то теперь волновая функция

имеет вид, изображенный на рис. 59. Таким образом, очень интенсивная волна, запертая в яме, отражается от обоих барьеров внутри ямы в такой фазе, что эта волна постепенно усиливается и очень медленно просачивается из ямы.

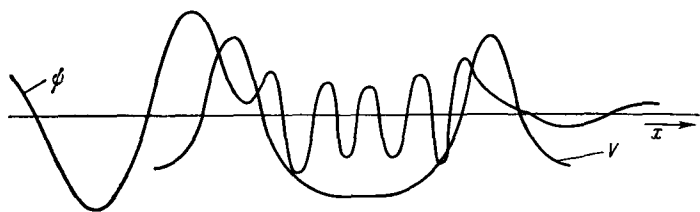


Рис. 58.

Образование волны между барьерами вблизи резонанса весьма напоминает процесс возникновения интенсивных стоячих волн в органической трубке или в резонансной полости с электромагнитными колебаниями. В последних примерах малый периодический импульс, сообщаемый извне, может создать интенсивную волну внутри при условии,

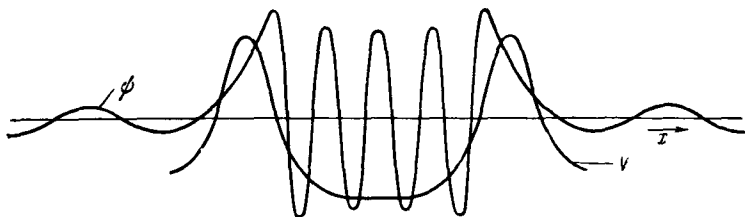


Рис. 59.

что этот импульс имеет частоту, близкую к частоте резонирующей системы. Чем меньше в системе потери на трение, излучение и т. д., тем больше амплитуда волны и острее резонанс. Квантовомеханическая задача совершенно подобна этой, так как волна, приходящая извне, ведет себя так же, как внешняя возбуждающая сила гармонического осциллятора. Если эта волна имеет такую же частоту, как и волна, испытывающая многократное отражение внутри ямы, то там возникает интенсивное колебание. Чем меньше потери, обусловленные прозрачностью барьера, тем интенсивнее волна в яме и тем острее резонанс. Таким образом, мы видим, что существует очень близкая аналогия рассматриваемого резонанса с механическими и электрическими резонансными явлениями.

Высокая прозрачность при резонансе вызывается тем, что волна в яме так велика, что даже если малая часть ее просочится сквозь барьер, то это дает заметный результат. Вследствие большой ампли-

туды появляется также большая вероятность попадания в область между барьерами. Это обусловлено тем, что ток вероятности через барьер пропорционален $\psi^* \text{grad } \psi - \psi \text{grad } \psi^*$, поэтому если амплитуда ψ достаточно велика, то компенсируется эффект малой прозрачности барьера. Зависимость прозрачности от интенсивности волны между барьерами является специфически волновым явлением. Трудно, например, представить себе, почему проникновение частиц через барьер может зависеть от того, что произойдет с ними после того, как они уже попадут внутрь ямы. Аналогию с явлением максимума прозрачности для волны вблизи резонанса можно усмотреть в простых гармонических колебаниях маятника. Если заданная внешняя периодическая сила находится в резонансе с маятником, то скорость передачи энергии маятнику пропорциональна амплитуде колебаний, которая уже существует.

В первом приближении волна внутри барьера напоминает волновую функцию для связанного состояния, так как она велика в ограниченной области пространства. Более того, если мы образуем волновой пакет, то увидим, что при рассмотрении его как функции времени он входит в яму, задерживается там на длительное время и медленно просачивается наружу сквозь барьер. Поэтому, пока волновой пакет находится в яме, его очень трудно отличить от волновой функции связанного состояния. Действительно, метастабильные состояния в яме с барьерами значительно больше походят на связанные состояния, чем на метастабильные состояния в потенциальной яме без барьеров, главным образом потому, что их время жизни значительно больше из-за малой прозрачности барьеров.

Такого же типа весьма интенсивная волна получается при полном внутреннем отражении света внутри тонкой стеклянной пластинки, которая расположена с очень тонким воздушным зазором между двумя толстыми стеклянными пластинками, как это показано на рис. 60. Для определенных длин волн наблюдается полная прозрачность, и свет внутри средней стеклянной пластинки имеет очень большую интенсивность. Это можно обнаружить с помощью маленького дефекта в средней пластинке, который ярко светится для определенных цветов.

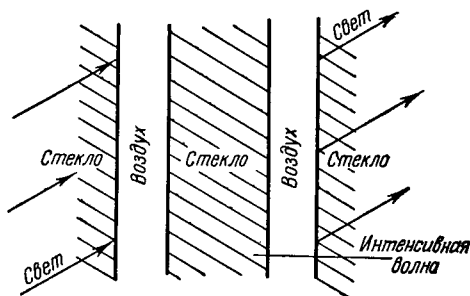


Рис. 60.

18. Образование волновых пакетов. Время жизни виртуальных состояний. образуем теперь волновой пакет, подобно тому, как мы это делали в задаче с прямоугольной потенциальной ямой. Для

этой цели удобно выбрать нормировочный фактор A так, чтобы падающая волна имела вид $\frac{1}{\sqrt{p}} \exp \left[i \left(\int_{-a}^x p \frac{dx}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right) \right]$. Тогда, согласно уравнению (12.62), для A следует взять величину

$$A = -2 \left[2 \cos \frac{1}{2} \left(\frac{\pi - J}{\hbar} \right) + i \left(4\Theta^2 + \frac{1}{4\Theta^2} \right) \sin \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right]^{-1}. \quad (12.68)$$

Полагая $A = -Re^{i\varphi}$, получим

$$\operatorname{tg} \varphi = -\frac{1}{2} \left(4\Theta^2 + \frac{1}{4\Theta^2} \right) \operatorname{tg} \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right). \quad (12.69)$$

Для образования волнового пакета произведем интегрирование по малому интервалу энергий. Падающая волна при этом будет иметь вид

$$\psi_{\text{пад}} = \int f(E - E_0) \frac{dE}{\sqrt{p}} \exp \left[i \left(\int_{-a}^x p \frac{dx}{\hbar} + \frac{\pi}{4} - \frac{Et}{\hbar} \right) \right]. \quad (12.70)$$

Прошедшая через яму волна будет равна

$$\psi_{\text{пр}} = \int f(E - E_0) R(E) \frac{dE}{\sqrt{p}} \exp \left[i \left(\int_a^x p \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} + \varphi - \frac{Et}{\hbar} \right) \right]. \quad (12.71)$$

Центр падающего волнового пакета находится в точке с экстремальной фазой, для которой

$$\begin{aligned} t &= \frac{\partial}{\partial E} \int_{-a}^x p dx = \frac{\partial}{\partial E} \int_{-a}^x \sqrt{2m(E - V)} dx = \\ &= \int_{-a}^x \frac{dx}{\sqrt{2 \frac{E - V}{m}}} = - \int_x^{-a} \frac{dx}{v}. \end{aligned} \quad (12.72)$$

Таким образом, падающая волна проходит через точку x в момент времени t , являющийся отрицательным по отношению к моменту времени, который был бы для волны, проходящий от точки x до точки поворота $-a$.

Для центра прошедшего волнового пакета

$$t = \frac{\partial}{\partial E} \int_a^x p dx + \hbar \frac{\partial \varphi}{\partial E} = \int_a^x \frac{dx}{v} + \hbar \frac{\partial \varphi}{\partial E}. \quad (12.73)$$

Время прохождения точки x как раз равно времени, необходимому для перехода от точки a до точки x , плюс $\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial E}$. Поэтому величина $\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial E}$ приближенно равна времени запаздывания волнового пакета из-за его многократного отражения внутри потенциальной ямы. Дифференцируя (12.69), получим

$$\begin{aligned} \hbar \sec^2 \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial E} &= \frac{1}{4} \left(4\Theta^2 + \frac{1}{4\Theta^2} \right) \left[\sec^2 \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right] \frac{\partial J}{\partial E} - \\ &\quad - \frac{\hbar}{\Theta} \left(4\Theta^2 - \frac{1}{4\Theta^2} \right) \left[\operatorname{tg} \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right] \frac{\partial \Theta}{\partial E}, \\ \left\{ \left[\sec^2 \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right] \left(\Theta^2 + \frac{1}{16\Theta^2} \right) \frac{\partial J}{\partial E} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{4\hbar}{\Theta} \left(\Theta^2 - \frac{1}{16\Theta^2} \right) \left[\operatorname{tg} \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right] \frac{\partial \Theta}{\partial E} \right\} \\ \hbar \frac{\partial \varphi}{\partial E} &= \frac{\quad}{1 + 4 \left(\Theta^2 + \frac{1}{16\Theta^2} \right)^2 \operatorname{tg}^2 \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right)}. \quad (12.74a) \end{aligned}$$

Мы видим, что если Θ велико, то время запаздывания будет мало, если не выполняется условие $\frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \cong N\pi$, или, иными словами, если мы не близки к виртуальному энергетическому уровню. Для виртуального энергетического уровня имеем

$$\Delta t = \hbar \frac{\partial \varphi}{\partial E} = \left(\Theta^2 + \frac{1}{16\Theta^2} \right) \frac{\partial J}{\partial E} \cong \tau \Theta^2 \quad (12.74б)$$

для больших Θ , когда $\frac{\partial J}{\partial E} = \tau$ равно классическому периоду. Таким образом, когда Θ велико, появление частицы по другую сторону ямы задерживается на время, значительно большее того, которое необходимо для прохождения ямы и возвращения назад. Заметим, что объяснение этого явления запаздывания такое же, как и в случае прямоугольной потенциальной ямы вблизи резонанса (см. гл. 11, пп. 8 и 20). Для доказательства этого заметим, что отношение $1/\tau$ равно числу ударов частиц о барьер за 1 сек, а Θ^{-2} — коэффициент прозрачности для барьера (уравнение (12.46б)). Таким образом для среднего времени прохождения через барьеры получается величина порядка $\tau \Theta^2$.

19. Волновой пакет внутри потенциальной ямы (вблизи резонанса). Для более яркой иллюстрации того факта, что частица задерживается внутри потенциальной ямы в течение долгого времени, вычислим волновой пакет внутри области III. Для этого нужно проинтегрировать функцию ψ_{III} , определяемую уравнением (12.57),

по малому интервалу энергий вблизи резонансной точки E_N . Это дает

$$\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{III}(E) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) f(E - E_N) dE. \quad (12.75)$$

Для демонстрации существования времени запаздывания Δt нужно выбрать достаточно узкий волновой пакет, чтобы он проходил через данную точку за время, меньшее чем искомый промежуток запаздывания. В противном случае время запаздывания нельзя было бы отличить от возможных флуктуаций по времени, обусловленных шириной пакета. Согласно соотношению неопределенностей, времени прохождения заданной точки пространства с точностью Δt соответствует область энергий $\Delta E \sim \hbar/\Delta t$. Следовательно, надо предполагать, что $f(E - E_N)$ велико только внутри этой области.

Мы получаем ψ_{III} из уравнения (12.57), пренебрегая членами, содержащими $1/\Theta$, которые предполагаются малыми. Заметим также, что при резонансе $\sin \frac{1}{2}\left(\pi - \frac{J}{\hbar}\right) = 0$ и $\cos \frac{1}{2}\left(\pi - \frac{J}{\hbar}\right) = 1$. Вблизи резонанса разложим эти величины, сохраняя только члены первого порядка. Таким образом,

$$\begin{aligned} \cos \frac{1}{2}\left(\pi - \frac{J}{\hbar}\right) &\cong \pm 1, \quad \sin \frac{1}{2}\left(\pi - \frac{J}{\hbar}\right) \cong \mp \frac{1}{2\hbar} \frac{\partial J}{\partial E} (E - E_N) = \\ &= \mp \frac{\tau_0}{2\hbar} (E - E_N), \end{aligned}$$

где $\tau_0 = \frac{\partial J}{\partial E}$. Получив A из уравнения (12.68), мы приходим к выражению

$$\psi_{III} \cong -\frac{2i}{\sqrt{p_w}} \Theta \frac{\cos\left(\int_x^b p \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right)}{1 - i\Theta^2\left(\frac{\tau_0}{\hbar}\right)(E - E_N)}. \quad (12.76)$$

Так как Θ велико, то ψ_{III} становится малой величиной для значений $E - E_N$, которые все еще настолько малы, что разложение законно. Следовательно, главная доля в ψ будет получаться от сравнительно малых значений $E - E_N$. Поэтому можно заменить p_w на его значение при резонансе (p_N), так как p_w существенно не изменяется в той области, в которой знаменатель мал. Итак,

$$\psi_{III} \cong -\frac{2i\Theta}{\sqrt{p_N}} \cos\left(\int_x^b p_N \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right) \frac{1}{1 - \frac{i\Theta^2}{\hbar} \tau_0 (E - E_N)} \quad (12.77)$$

и

$$\psi \cong - \frac{2i\theta}{V p_N} \cos \left(\int_x^b p_N \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) \int \frac{f(E - E_N) \exp \left(\frac{-iEt}{\hbar} \right) dE}{1 - i(E - E_N) \frac{\Delta t}{\hbar}}, \quad (12.78a)$$

где мы положили

$$\Delta t = \tau_0 \theta^2. \quad (12.78b)$$

Величина $f(E - E_N)$ была выбрана так, чтобы она была велика в области, гораздо большей чем $\hbar/\Delta t$. Следовательно, обратная величина знаменателя становится малой при значительно меньших значениях $E - E_N$, чем числитель. Поэтому в первом приближении можно рассматривать $f(E - E_N)$ как постоянную, которую для удобства примем равной единице. Тогда оставшуюся подынтегральную функцию легко проинтегрировать стандартными методами. В результате получаем ([33], стр. 123 или стр. 166 перевода, задача 15)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iEt/\hbar} dE}{1 - i(E - E_N) \frac{\Delta t}{\hbar}} = \begin{cases} \frac{2\hbar\pi}{\Delta t} e^{-iE_N t/\hbar} e^{-t/\Delta t} & t > 0, \\ 0 & t < 0. \end{cases} \quad (12.79)$$

Следовательно, имеем

$$\psi \cong \left[\frac{\hbar}{\Delta t} \frac{4\pi i\theta}{V p_N} \cos \left(\int_x^b p_N \frac{dx}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) e^{-iE_N t/\hbar} \right] \begin{cases} e^{-|t|/\Delta t} & t > 0, \\ 0 & t < 0. \end{cases} \quad (12.80)$$

Прерывное изменение волновой функции при $t=0$ обусловлено принятым нами приближением, что $f(E - E_N)$ — постоянная величина. Это эквивалентно предположению о бесконечно узком пакете. Как раз тогда, когда пакет сталкивается с барьером при $t=0$, волновая функция внутри ямы при этом внезапно возрастает от нуля до некоторой определенной величины. Если принять во внимание ширину пакета и не пользоваться разложением по степеням $E - E_N$, то время возрастания амплитуды волновой функции внутри ямы должно несколько отличаться от нуля.

Однако наиболее интересным в полученном результате является то, что волновая функция после момента времени $t=0$ будет равна волновой функции истинного стационарного состояния, за исключением множителя, дающего экспоненциальный спад со временем.

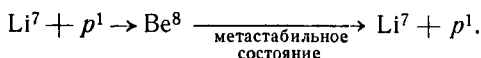
20. Соотношение неопределенностей. Из определения Δt (уравнение (12.78b)) и ΔE — ширины резонанса (уравнение (12.65b)) ясно, что $\Delta E \Delta t \sim \hbar$. Это означает, что для создания виртуального уровня нужно пользоваться волновым пакетом шириной $\Delta E \sim \hbar/\Delta t$. В результате, когда состояние нарушится, появятся частицы с энергиями,

лежащими в этой области. Этим интервалом энергий также следует пользоваться при образовании виртуально связанного состояния.

21. Применение к радиоактивным системам. Эти выводы могут быть весьма непосредственно применены к радиоактивным системам*). Предположим, что радиоактивное ядро образовалось в некоторый момент времени, который обозначим через $t = 0$. Точный механизм образования такого ядра не столь важен для последующего его поведения. Оно может образоваться, например, при бомбардировке, для которой в наших примерах используется падающий волновой пакет, проникающий в область между барьерами. После образования метастабильного состояния ядро распадается по экспоненциальному закону, и появляется волна в области за барьерами. Это точно описывает вероятность процесса распада.

Для демонстрации существования метастабильного состояния надо, как мы видели, образовать его с помощью падающего волнового пакета, который должен быть достаточно узким, чтобы пройти данную точку за время, меньшее времени жизни Δt . Типичным случаем, например, является бомбардировка ядра α -частицами. Время прохождения α -частицы через данную точку пространства можно легко контролировать на электронной измерительной аппаратуре с точностью до 10^{-6} сек. Возникающее метастабильное радиоактивное состояние может иногда иметь время жизни порядка нескольких секунд. Поэтому можно очень легко обнаружить существование метастабильного состояния, но если время проникновения частицы в ядро определяется величиной порядка более часа, то эксперимент нельзя использовать для доказательства существования такого состояния.

22. Применение к ядерным реакциям. В типичной ядерной реакции протон, у которого энергия недостаточна, чтобы пройти над кулоновским барьером, может, столкнувшись с ядром, случайно просочиться через барьер (см. п. 12). Если энергия такова, что может образоваться виртуальное состояние с большим временем жизни, то протон может долгое время оставаться внутри ядра, а затем быть вновь излучен. Кроме того, мы видели, что вблизи резонанса велика вероятность попадания в ядро через барьер. Такой ядерной реакцией может быть, например, следующая:



*) В действительности процесс распада метастабильного ядра сильно идеализирован при такой трактовке, так как в ней пренебрегают многими важными факторами. Приводимая здесь трактовка не является полной теорией ядерного распада, а лишь иллюстрирует волновые свойства вещества в квантовой теории. Для более полного ознакомления с вопросом см. [26].

В действительности мы слишком идеализировали положение.

1) Эта задача трехмерная. Трехмерная трактовка более или менее похожа на одномерный случай. При ее решении обнаруживается, что вблизи виртуального уровня также существует большая вероятность попадания в ядро путем проникновения через барьер, а также метастабильного состояния с большим временем жизни. Однако, когда частица покидает ядро, она может быть испущена в любом направлении. Следовательно, в итоге имеет место рассеяние падающего протона. Поэтому вблизи виртуального уровня наблюдается резкое возрастание вероятности рассеяния, которое напоминает по своему характеру резкое возрастание прозрачности, показанное на рис. 57.

2) Пока протон находится в ядре, могут иметь место дополнительные реакции (см. [26], гл. 17). Например, если существуют истинные связанные состояния, то протон может излучить некоторый излишек энергии, и образуется устойчивое ядро. В итоге протон не будет вновь излучен. При реакции $\text{Li}^7 + p^1$ могут излучаться γ -лучи, и образуется другое состояние Be^8 . В случае Be^8 система может также освободиться от излишка энергии, распавшись на две α -частицы. В других ядрах существуют еще другие возможности. Например, входящий протон может передать свою энергию нейтрону уже в ядре, которое затем испускает нейтрон, оставляя протон связанным внутри ядра. Такая реакция, результирующий эффект которой заключается в замене свободного протона свободным нейтроном, называется $p-n$ -реакцией.

Итак, в общем случае существует много конкурирующих реакций и только одна из них представляет собой излучение первоначально бомбардирующей частицы без потери энергии. Если R_i — скорость, с которой совершается i -й процесс, то полная скорость нарушения метастабильного состояния будет $R = \sum_i R_i$, а время жизни его $\Delta t = 1/R$. Тогда, согласно соотношению неопределенностей, можно показать, что ширина уровня соответственно возрастает до величины $\delta E \cong \hbar/\Delta t$. При этом резонансная линия уширяется, если метастабильное ядро может распадаться каким-нибудь образом, отличным от вторичной эмиссии падающей частицы*).

*) Более полное обсуждение этой проблемы резонанса можно найти в работах [34—36].

ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

1. Введение. Рассмотрим теперь гармонический осциллятор, который важен особенно потому, что поле излучения действует подобно совокупности таких осцилляторов (гл. 1, п. 8). Кроме того, многие системы можно представить приближенно в виде гармонического осциллятора. Например, потенциальная энергия двух атомов как функция расстояния между ними обычно представляется кривой, изображенной на рис. 61. Обычно существует некоторое расстояние $x = a$, для которого потенциал минимален. Эта точка соответствует устойчивому равновесию. Вблизи этой точки потенциал может быть разложен в ряд по степеням малых величин $(x - a)$, а так как в этой точке $\frac{\partial V}{\partial x} = 0$, то будем иметь

$$V \cong \frac{k}{2} (x - a)^2. \quad (13.1)$$

Это выражение и является потенциалом гармонического осциллятора.

В общем случае любую систему, находящуюся в устойчивом равновесии, можно вблизи положения равновесия представить в виде гармонического осциллятора.

2. Волновое уравнение. Для осциллятора с квазиупругой постоянной k потенциал равен $V = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$, где ω — угловая частота колебаний. Тогда волновое уравнение имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + \left(\frac{m\omega^2 x^2}{2} - E \right) \psi = 0. \quad (13.2)$$

Удобно воспользоваться подстановкой

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} y, \quad E = \frac{\omega \hbar}{2} \varepsilon.$$

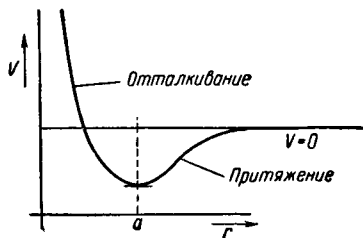


Рис. 61.

Тогда уравнение (13.2) примет вид

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + (\epsilon - y^2)\psi = 0. \quad (13.3)$$

3. Общая форма решений. Как показано на рис. 62, потенциальная яма имеет параболическую форму. Для достаточно больших значений $|x|$ потенциальная энергия всегда больше, чем полная энергия, поэтому решение волнового уравнения является линейной комбинацией вещественных экспоненциальных функций. Чтобы найти вид этих экспоненциальных функций, можно воспользоваться приближением ВКБ (см. уравнение (12.37)). Решение для больших $|x|$ будет содержать

$$\exp \left[\pm \int_a^x \sqrt{2m(V-E)} \frac{dx}{\hbar} \right].$$

Но для больших $|x| V \gg E$, поэтому

$$\sqrt{V-E} \cong \sqrt{V} = \sqrt{\frac{m}{2}} \omega x.$$

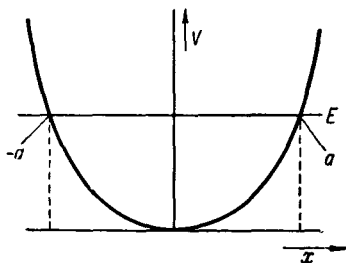


Рис. 62.

Следовательно, решения по порядку величины равны

$$A \exp\left(\frac{m\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2}\right) + B \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2}\right). \quad (13.4)$$

Нужно выбрать такое решение, которое экспоненциально убывает при больших $|x|$. Таким образом, если при больших отрицательных значениях x решение изменяется как

$$\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2}\right),$$

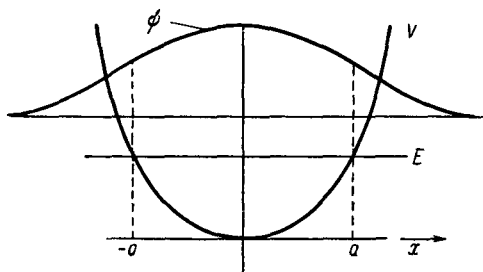


Рис. 63.

то и при больших положительных значениях x должен быть тот же тип решения. Поэтому необходимо, чтобы решение в области с положительной кинетической энергией (т. е. при $|x| > a$) имело вид убывающей экспоненциальной кривой. Эта задача аналогична определению связанных состояний в прямоугольной потенциальной яме (гл. 11, п. 12). Волновая функция наинизшего состояния не имеет узлов, как это показано на рис. 63. Волновая функция следующего

состояния, которое имеет один узел, показана на рис. 64. Следует заметить, что при более высоких энергиях не только происходит более быстрое затухание волновой функции, но также и возрастает область с положительным значением кинетической энергии. Для очень высоких квантовых состояний волновая функция имеет очень много колебаний, и приближение ВКБ (уравнение (12.17)) будет

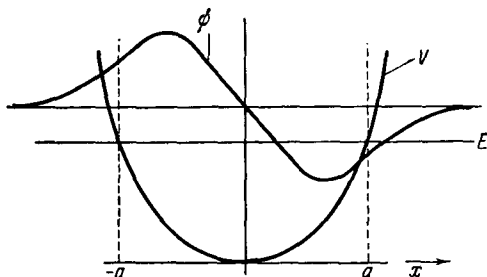


Рис. 64.

достаточно точным. В данном случае нет никаких ограничений числа возможных связанных состояний, так как при $x \rightarrow \infty$ потенциал становится бесконечно большим. Поэтому всегда возможно увеличивать энергию и таким путем заставить волновую функцию совершить еще одно колебание прежде, чем она достигнет области с отрицательной

кинетической энергией. Однако если ограничить бесконечный рост потенциала при больших значениях x , как это имеет место, например, в случае межатомных сил (см. рис. 61), то число связанных состояний будет конечным.

4. Методы точного решения. Общий метод нахождения собственных значений и собственных функций для уравнения типа (13.3) прежде всего заключается в представлении решения вблизи равновесного состояния с помощью степенных рядов, в которых оставлено достаточное число членов, чтобы решение могло быть продолжено в область с экспоненциально спадающей функцией. Если ряды не сходятся во всей области, то может оказаться необходимым воспользоваться численным интегрированием или же последовательными разложениями в нескольких различных точках. В любом случае следует выбрать степенные ряды так, чтобы они непрерывно смыкались с экспоненциально убывающей функцией. В общем случае, как было показано для прямоугольной потенциальной ямы, такое смыкание осуществляется для определенной совокупности дискретных значений. Эти значения являются собственными значениями задачи, а соответствующие им решения — собственными функциями.

5. Шрёдингеровский метод факторизации. Хотя описанной выше процедурой обычно и пользуются при решении задачи гармонического осциллятора (см. [10], стр. 67—72), так же как и для многих других подобных задач, но мы используем здесь простой метод, развитый Шрёдингером ([37]; см. также [4], гл. 6), который, однако, ограничен в своих применениях. Несмотря на это, как мы увидим, его можно применить к решению ряда задач, которые будут

рассмотрены ниже, и, в частности, к задаче квантования момента количества движения (см. гл. 14).

Метод заключается в разложении оператора Гамильтона на произведение двух операторов, каждый из которых содержит только первые производные. В нашей задаче это можно сделать, так как

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2\right)\psi = \left[\left(\frac{d}{dy} - y\right)\left(\frac{d}{dy} + y\right) - 1\right]\psi. \quad (13.5)$$

Тогда уравнение (13.3) может быть записано в следующем виде:

$$\left(\frac{d}{dy} - y\right)\left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_\epsilon = -(\epsilon - 1)\psi_\epsilon, \quad (13.6)$$

где ψ_ϵ — собственная функция, принадлежащая собственному значению ϵ . Затем необходимо подействовать на это уравнение слева оператором $\left(\frac{d}{dy} + y\right)$. При этом заметим, что

$$\left(\frac{d}{dy} + y\right)\left(\frac{d}{dy} - y\right) = \frac{d^2}{dy^2} - y^2 - 1.$$

Поэтому получаем

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dy} + y\right)\left(\frac{d}{dy} - y\right)\left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_\epsilon &= \\ &= \left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 - 1\right)\left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_\epsilon = -(\epsilon - 1)\left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_\epsilon. \end{aligned} \quad (13.7)$$

Полагая, что $\left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_\epsilon = \varphi_\epsilon$ является новой волновой функцией, получим

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2\right)\varphi_\epsilon = -(\epsilon - 2)\varphi_\epsilon. \quad (13.8)$$

Следовательно, если ψ_ϵ — собственная функция уравнения Шрёдингера, соответствующая собственному значению ϵ , то $\varphi_\epsilon = \left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_\epsilon$ — собственная функция того же уравнения, соответствующая собственному значению $\epsilon - 2$. Таким образом, задавая какое-нибудь одно решение, можно всегда получить другое. Кроме того, если ϵ — собственное значение, то $\epsilon - 2$ также должно быть допустимым собственным значением.

Эту процедуру можно продолжать до бесконечности, и, следовательно, если ϵ — собственное значение, то $\epsilon - 2n$ тоже — собственное значение, где n — целое число. Но если n делается достаточно большим, то собственное значение (и соответственно энергия) будет постепенно становиться отрицательным, так как ϵ пропорционально энергии. Но можно легко показать, что энергия гармонического осцил-

лятора всегда положительна. Для среднего значения энергии E имеем

$$\bar{E} = \int \psi^* H \psi dx = - \int \frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx + \int \psi^* \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi dx. \quad (13.9a)$$

Интегрирование первого интеграла по частям (заметим, что внеинтегральный член исчезает, так как $\psi \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$) дает

$$\bar{E} = \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \frac{m\omega^2}{2} \int \psi^* x^2 \psi dx. \quad (13.9б)$$

Оба интеграла по определению положительны, следовательно, $\bar{E} > 0$. Но для собственной функции

$$\bar{E} = \int \psi_E^* H \psi_E dx = E \int \psi_E^* \psi_E dx = E, \quad (13.9в)$$

так как предполагается, что ψ нормирована. Следовательно, все собственные значения E и соответственно ϵ должны быть положительны.

Как можно избежать это противоречие? Только, если наимизшее положительное значение ϵ таково, что $\left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_\epsilon = 0$. В этом случае нельзя получить решений с отрицательным ϵ . Умножая последнее уравнение на оператор $\left(\frac{d}{dy} - y\right)$, имеем

$$\left(\frac{d}{dy} - y\right)\left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_\epsilon = \frac{d^2 \psi_\epsilon}{dy^2} - y^2 \psi_\epsilon + \psi_\epsilon = 0. \quad (13.10)$$

Из выражения (13.10) видно, что наимизшим значением ϵ должно быть $\epsilon = 1$. Тогда допустимыми значениями ϵ будут только значения $\epsilon = 2n + 1$, где n — целое число. Поэтому собственные значения ϵ будут

$$\epsilon = 2n + 1, \quad (13.11)$$

а собственные значения E будут

$$E = (2n + 1) \frac{\hbar\omega}{2} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega. \quad (13.12)$$

Следовательно, мы доказали, что собственные значения гармонического осциллятора точно равны собственным значениям, полученным с помощью приближения ВКБ (уравнение (12.55)), даже с точностью до полуцелого квантования энергии.

Задача 1. Объяснить, почему наимизшее состояние осциллятора не может обладать нулевой энергией.

6. Решение для волновых функций. Можно легко найти волновую функцию наимизшего состояния. Уравнение для ее определения имеет вид

$$\frac{d\psi_0}{dy} + y\psi_0 = 0 \quad \text{или} \quad \frac{d\psi_0}{\psi_0} + y dy = 0. \quad (13.13a)$$

Его решением будет

$$\psi_0 = Ae^{-y^2/2}, \quad (13.136)$$

где A постоянная. Чтобы нормировать волновую функцию, надо выбрать A равным $1/\sqrt{\pi}$. Таким образом, волновая функция наинизшего состояния является просто гауссовской функцией ошибок.

Все остальные волновые функции могут быть получены из функции ψ_0 . Для этого сначала запишем уравнение Шрёдингера в следующем виде:

$$\left(\frac{d}{dy} + y\right)\left(\frac{d}{dy} - y\right)\psi_\varepsilon = -(\varepsilon + 1)\psi_\varepsilon. \quad (13.14)$$

Умножение слева на оператор $\left(\frac{d}{dy} - y\right)$ дает

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dy} - y\right)\left(\frac{d}{dy} + y\right)\left(\frac{d}{dy} - y\right)\psi_\varepsilon = \\ = \left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 + 1\right)\left(\frac{d}{dy} - y\right)\psi_\varepsilon = -(\varepsilon + 1)\left(\frac{d}{dy} - y\right)\psi_\varepsilon \end{aligned} \quad (13.15)$$

или

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2\right)\left(\frac{d}{dy} - y\right)\psi_\varepsilon = -(\varepsilon + 2)\left(\frac{d}{dy} - y\right)\psi_\varepsilon. \quad (13.16)$$

Мы видим, что функция $\varphi = \left(\frac{d}{dy} - y\right)\psi_\varepsilon$ удовлетворяет уравнению Шрёдингера, но соответствует собственному значению $\varepsilon + 2$. (Заметим, что $\varepsilon = 2n + 1$, где n — квантовое число.) Следовательно, если мы имеем какую-нибудь собственную функцию ψ_ε , то, подействовав на нее оператором $\left(\frac{d}{dy} - y\right)$, всегда можно построить следующую, более высокую собственную функцию. Таким образом, из ψ_0 можно получить все собственные функции; n -я собственная функция будет

$$\psi_n = C_n (-1)^n \left(\frac{d}{dy} - y\right)^n \psi_0 = C_n (-1)^n \left(\frac{d}{dy} - y\right)^n e^{-y^2/2}, \quad (13.17)$$

где C_n — нормировочный фактор, который мы определим в п. 8.

Выполняя эти операции, мы получим несколько первых собственных функций

$$\psi_0 \sim e^{-y^2/2}, \quad (13.18a)$$

$$\psi_1 \sim 2ye^{-y^2/2}, \quad (13.18б)$$

$$\psi_2 \sim (2y^2 - 1)e^{-y^2/2}. \quad (13.18в)$$

7. Полиномы Эрмита — Чебышева *). В общем случае функция ψ_n равна произведению $e^{-y^2/2}$ на полином n -й степени. Таким образом, можно написать

$$\psi_n = C_n e^{-y^2/2} h_n(y), \quad (13.19a)$$

где h_n — интересующий нас полином. h_n называется полиномом Эрмита — Чебышева. Можно также написать

$$h_n(y) \sim e^{y^2/2} \psi_n(y). \quad (13.19b)$$

Несколько более удобное выражение для h_n можно получить, если принять во внимание, что для произвольной функции φ справедливо следующее соотношение:

$$\left(\frac{d}{dy} - y\right)\varphi = e^{y^2/2} \frac{d}{dy} (e^{-y^2/2} \varphi). \quad (13.20)$$

Поэтому мы получаем из уравнения (13.17)

$$\psi_1 = -C_1 e^{y^2/2} \frac{d}{dy} e^{-y^2}; \quad \psi_2 = C_2 e^{y^2/2} \frac{d^2}{dy^2} e^{-y^2}; \quad (13.21)$$

$$\begin{aligned} \psi_n &= (-1)^n C_n e^{y^2/2} \frac{d}{dy} e^{-y^2/2} e^{+y^2/2} \frac{d^{n-1}}{dy^{n-1}} e^{-y^2} = \\ &= (-1)^n C_n e^{y^2/2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} = C_n e^{-y^2/2} h_n(y). \end{aligned} \quad (13.22)$$

8. Нормирующий множитель. Для вычисления нормирующего множителя полагаем

$$\psi_n^* = C_n^* e^{-y^2/2} h_n$$

и

$$\psi_n = C_n (-1)^n e^{y^2/2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}.$$

Условия нормировки принимают вид

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n dy = (-1)^n |C_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} h_n(y) \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} dy = 1. \quad (13.23)$$

Проинтегрируем теперь это выражение по частям n раз, замечая, что внеинтегральные члены всегда равны нулю. Каждый раз при интегрировании по частям мы выносим множитель -1 . Это дает $(-1)^n$, что погашает множитель $(-1)^n$, стоящий перед интегралом. В итоге получаем

$$|C_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} \frac{d^n}{dy^n} h_n(y) dy = 1. \quad (13.24)$$

*) В соответствии с терминологией, принятой в нашей литературе, термин «полином Эрмита» заменен термином «полином Эрмита — Чебышева». — *Прим. ред.*

Так как $h_n(y)$ — полином n -й степени, то дифференцирование уничтожит все члены, за исключением тех, которые содержат y^n . Совершая подстановку

$$h_n(y) = \sum_{\gamma=0}^n A_{\gamma} y^{\gamma}$$

и замечая, что $\frac{d^n}{dy^n} y^n = n!$, находим

$$\frac{d^n}{dy^n} h_n(y) = n! A_n. \quad (13.25)$$

Чтобы вычислить A_n , заметим, что коэффициент при y^n в выражении $(-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}$ равен точно 2^n . Следовательно, получаем $A_n = 2^n$. Тогда уравнение (13.24) примет вид

$$|C_n|^2 2^n n! \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = 1 \quad \text{или} \quad C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}}. \quad (13.26)$$

Тогда нормированную волновую функцию как функцию y можно записать

$$\psi_n(y) = \frac{(-1)^n e^{y^2/2}}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} = \frac{e^{-y^2/2} h_n(y)}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}}. \quad (13.27)$$

Для нормировки волновой функции как функции $x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} y$ мы должны умножить ее на $\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar}}$. Тогда нормированная волновая функция как функция x будет

$$\psi_n(x) = \exp\left[-\left(m \frac{\omega}{\hbar}\right) \left(\frac{x^2}{2}\right)\right] h_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \frac{\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar}}}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}}. \quad (13.28)$$

9. Порождающая функция. Очень полезное соотношение для полинома Эрмита — Чебышева может быть получено, если $h_n(y)$ умножить на $t^n/n!$ и затем просуммировать по n . Это дает

$$\sum_0^{\infty} h_n(y) \frac{t^n}{n!} = e^{y^2} \sum_0^{\infty} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \frac{(-t)^n}{n!}. \quad (13.29)$$

Если функцию $e^{y^2} e^{-(t-y)^2} = e^{-t^2+2ty}$ разложить в ряд по степеням t , то мы в точности получим написанный выше ряд. Следовательно, можно записать

$$e^{-t^2+2ty} = \sum_0^{\infty} h_n(y) \frac{t^n}{n!}; \quad (13.30)$$

величина e^{-t^2+2ty} называется *порождающей (генерирующей) функцией* полинома Эрмита — Чебышева, потому что при ее разложении в ряд по степеням t можно получить все эти полиномы.

10. Рекуррентные соотношения. Порождающую функцию можно использовать для вывода многих полезных соотношений между различными полиномами Эрмита — Чебышева. Например, если продифференцировать уравнение (13.30) по y , то получим

$$2te^{-t^2+2ty} = \sum_0^{\infty} \frac{dh_n}{dy} \frac{t^n}{n!} = 2 \sum_0^{\infty} h_n(y) \frac{t^{n+1}}{n!}. \quad (13.31)$$

Так как это должно быть справедливо при всех t , то коэффициенты при одинаковых степенях t должны быть равны. Уравнение (13.31) может быть записано в виде

$$\sum_1^{\infty} \frac{t^n}{n!} \left(\frac{dh_n}{dy} - 2nh_{n-1} \right) = 0. \quad (13.32)$$

Тогда получаем

$$\frac{dh_n}{dy} = 2nh_{n-1}. \quad (13.33)$$

Другое соотношение получается при дифференцировании по t :

$$2(y-t)e^{-t^2+2yt} = \sum_0^{\infty} h_n(y) \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} = 2(y-t) \sum_0^{\infty} h_n(y) \frac{t^n}{n!}. \quad (13.34)$$

Это уравнение можно переписать так:

$$\sum_0^{\infty} \frac{t^n}{n!} (2yh_n - 2nh_{n-1} - h_{n+1}) = 0, \quad (13.35)$$

отсюда получаем

$$2yh_n(y) = 2nh_{n-1}(y) + h_{n+1}(y). \quad (13.36)$$

11. Некоторые вспомогательные математические соотношения. Мы уже видели, что, задавая собственную функцию ψ_n , можно всегда построить собственную функцию, принадлежащую следующему, более высокому или более низкому собственному значению, умножая соответственно первую функцию на оператор $\left(\frac{d}{dy} - y\right)$ или $\left(\frac{d}{dy} + y\right)$. Это будет полезно нам позже, когда нужно будет выразить влияние этого оператора с помощью нормированных собственных функций ψ_n . Заметим прежде всего, что $-\left(\frac{d}{dy} - y\right)\psi_n = C\psi_{n+1}$, где C — постоян-

ная, которую надо выбрать так, чтобы сделать ψ_{n+1} также нормированной функцией. Поскольку предполагается, что ψ_n — нормированная функция, то

$$\psi_n = \frac{(-1)^n e^{y^2/2}}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}. \quad (13.37)$$

Замечая, что $-\left(\frac{d}{dy} - y\right)\psi_n = -e^{y^2/2} \frac{d}{dy}(e^{-y^2/2}\psi_n)$, получаем

$$\begin{aligned} -\left(\frac{d}{dy} - y\right)\psi_n &= \frac{(-1)^{n+1}}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} e^{y^2/2} \frac{d^{n+1}}{dy^{n+1}} e^{-y^2} = \\ &= \frac{\sqrt{2(n+1)} (-1)^{n+1} e^{y^2/2}}{\sqrt{2^{n+1} (n+1)!} \sqrt{\pi}} \frac{d^{n+1}}{dy^{n+1}} e^{-y^2} = \sqrt{2(n+1)} \psi_{n+1}. \end{aligned} \quad (13.38)$$

Для получения $\left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_n$ напомним (см. уравнение (13.14))

$$\left(\frac{d}{dy} + y\right)\left(\frac{d}{dy} - y\right)\psi_{n-1} = \left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 - 1\right)\psi_{n-1} = -2n\psi_{n-1}.$$

Воспользовавшись также доказанным соотношением $\left(\frac{d}{dy} - y\right)\psi_{n-1} = -\sqrt{2n}\psi_n$, получим

$$\left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_n = \sqrt{2n}\psi_{n-1}. \quad (13.39)$$

12. Общий вид решения. n -я собственная функция равна полиному n -й степени, умноженному на $e^{-y^2/2}$. Последний множитель обеспечивает стремление волновой функции к нулю при $y \rightarrow \infty$. Полином h_n имеет n корней, следовательно, волновая функция имеет n узлов. В этом отношении она качественно похожа на волновые функции приближения ВКБ (гл. 12, п. 13; см. также [10], стр. 73—82), так как при n узлах она будет претерпевать соответствующее число колебаний. Мы видим еще раз, что номер квантового состояния равен числу узлов решения. В общем случае волновая функция колеблется внутри классически достижимой области ($E > V$) и затухает по гауссовскому закону там, где $E < V$.

13. Свойства ортогональности полиномов Эрмита — Чебышева. Согласно гл. 10, п. 24, собственные функции эрмитовского оператора, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны. Это означает, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m dy = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2} h_m(y) h_n(y) dy}{\sqrt{2^{n+m} n! m! \pi}} = 0, \quad (13.40)$$

когда $n \neq m$.

Предположим, что $m > n$. Тогда можно доказать приведенное выше утверждение, непосредственно записав

$$e^{-y^2/2} h_m(y) = (-1)^m e^{y^2/2} \frac{d^m}{dy^m} e^{-y^2}.$$

Это дает

$$\sqrt{2^{n+m} n! m! \pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m dy = (-1)^m \int_{-\infty}^{\infty} h_n(y) \frac{d^m}{dy^m} e^{-y^2} dy. \quad (13.41)$$

Интегрируя по частям m раз и замечая, что внеинтегральные члены равны нулю, приходим к выражению

$$(-1)^{m+n} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} \frac{d^m}{dy^m} h_n(y) dy. \quad (13.42)$$

Но дифференцирование полинома m раз дает нуль, если $m > n$. Следовательно, мы доказали ортогональность собственных функций гамильтониана гармонического осциллятора.

14. Постулат разложения. Согласно постулату разложения (гл. 10, п. 22), можно разложить произвольную функцию в ряд по собственным функциям оператора Гамильтона для гармонического осциллятора. Таким образом, для произвольной функции φ имеем

$$\varphi(y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C_n e^{-y^2/2}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} h_n(y). \quad (13.43)$$

Для определения коэффициентов C_n умножаем это выражение на $e^{-y^2/2} \frac{h_m(y)}{\sqrt{2^m m! \sqrt{\pi}}}$ и интегрируем по y . Используя свойства ортогональности и нормировки волновых функций, получаем

$$C_m = \frac{1}{\sqrt{2^m m! \sqrt{\pi}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2} h_m(y) \varphi(y) dy. \quad (13.44)$$

Пример. Разложение δ -функции.

Полагая $\varphi(y) = \delta(y - y_0)$, получаем

$$C_m = \frac{1}{\sqrt{2^m m! \sqrt{\pi}}} e^{-y_0^2/2} h_m(y_0) \quad (13.45)$$

и

$$\delta(y - y_0) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(y^2 + y_0^2)/2} \frac{h_n(y) h_n(y_0)}{2^n n! \sqrt{\pi}}. \quad (13.46)$$

Заметим, что для образования δ -функции надо перейти к очень возбужденным состояниям осциллятора. Другими словами, если частица очень точно локализована независимо от того, где происходит такая локализация, то энергия становится весьма неопределенной.

Построение δ -функции из полиномов Эрмита — Чебышева можно проиллюстрировать, рассматривая только первые три полинома:

$$\psi_0^* \psi_0 \sim e^{-y^2}, \quad (13.47a)$$

выражение симметрично относительно начала координат;

$$\psi_1^* \psi_1 \sim y^2 e^{-y^2}, \quad (13.47б)$$

выражение также симметрично относительно начала координат, но равно там нулю;

$$\psi_2^* \psi_2 \sim (2y^2 - 1)^2 e^{-y^2}, \quad (13.47в)$$

это произведение также симметрично относительно начала. Рассмотрим теперь линейные комбинации ψ_0 и ψ_1 :

$$\psi = a_0 \psi_0 + a_1 \psi_1 \sim e^{-y^2} (a_0 + a_1 y).$$

Таким образом, возможно образовать функцию, которая мала для отрицательных y и велика для положительных y . (Например, если положить

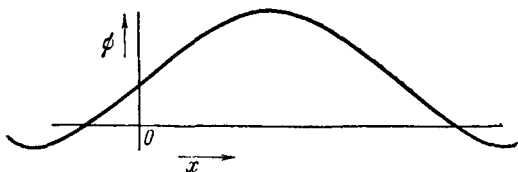


Рис. 65.

$a_0 = a_1 = 1$.) Такая функция показана на рис. 65. Если включать все больше и больше полиномов, то образуется все более и более локализованный пакет. Самое существенное здесь то, что для получения локализованного пакета требуется много энергетических состояний.

15. Волновые пакеты. Использование δ -функции предполагает существование волнового пакета, идеально точно локализованного, а потому представляет собой абстракцию. Интересно проследить движение волнового пакета, который первоначально был конечной протяженности. Рассмотрим, например, частицу, которая первоначально локализована в виде пакета

$$\psi(y) = e^{-(y-y_0)^2/2} = e^{-y^2/2} e^{yy_0 - y_0^2/2}. \quad (13.48)$$

Это пакет с центром в точке $y = y_0$.

Для того чтобы найти, как меняется со временем ψ , мы должны раньше всего разложить ψ в ряд по собственным функциям энергии E , а затем умножить n -ю собственную функцию на $\exp\left(\frac{-iE_n t}{\hbar}\right)$

(см. уравнение (10.73)). Для разложения ψ в ряд по полиномам Эрмита — Чебышева нужно было бы пользоваться уравнением (13.43). Но, к счастью, порождающая функция дает нам готовое разложение этого частного типа функции. Полагая $y_0 = 2\lambda$ и используя уравнение (13.30), получаем

$$\begin{aligned} [\psi(y)]_{t=0} &= \exp\left[-\left(\frac{y^2}{2} + \lambda^2\right)\right] \exp(2y\lambda - \lambda^2) = \\ &= \exp(-\lambda^2) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} h_n(y) \frac{\lambda^n}{n!}. \end{aligned} \quad (13.49)$$

Функции $e^{-y^2/2} h_n(y)$ являются собственными функциями гамильтониана, соответствующего энергии $E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$. Поэтому волновая функция принимает вид

$$\psi(y, t) = \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) \exp\left[-\left(\lambda^2 + \frac{y^2}{2}\right)\right] \sum_{n=0}^{\infty} h_n(y) \frac{(\lambda e^{-i\omega t})^n}{n!}. \quad (13.50)$$

Перепишем теперь вышеприведенную функцию и получим (пользуясь определением порождающей функции)

$$\psi(y, t) = \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) \exp\left[-\left(\lambda^2 + \frac{y^2}{2}\right)\right] \exp(-\lambda^2 e^{-2i\omega t} + 2\lambda e^{-i\omega t} y). \quad (13.51a)$$

Полагая $\lambda = y_0/2$, получаем

$$\begin{aligned} \psi(y, t) \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) \exp\left\{-\left[\frac{y^2}{2} + \frac{y_0^2}{4}(1 + e^{-2i\omega t}) - 2y \frac{y_0}{2} e^{-i\omega t}\right]\right\} &= \\ = \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[y^2 - 2yy_0 \cos \omega t + \frac{y_0^2}{2}(1 + \cos 2\omega t)\right]\right\} \times \\ \times \exp\left[\frac{i}{2}\left(y_0^2 \frac{\sin 2\omega t}{2} - 2yy_0 \sin \omega t\right)\right]. \end{aligned} \quad (13.51b)$$

Плотность вероятности равна при этом

$$\begin{aligned} P = \psi^* \psi &= \exp\left[-(y^2 - 2yy_0 \cos \omega t + y_0^2 \cos^2 \omega t)\right] = \\ &= \exp\left[-(y - y_0 \cos \omega t)^2\right]. \end{aligned} \quad (13.52)$$

Мы видим, что центр волнового пакета движется по классической траектории (т. е. $y = y_0 \cos \omega t$). Этого результата более или менее следовало ожидать, так как уравнение Шрёдингера в среднем приводит к классическим уравнениям движения. Но есть и необычная черта в движении этого пакета, а именно он не изменяет своей формы со временем. Нормально следовало ожидать, что волновые пакеты расплываются со временем, но с данным частным видом пакета этого не происходит. Мы не имеем возможности выяснить здесь полностью

причины этого необычного поведения, но можно сказать, что это обусловлено специфичностью волновых функций гармонического осциллятора, которой нет ни в какой другой системе. Некоторые сведения о причине такого поведения можно получить, если рассмотреть любую волновую функцию гармонического осциллятора, зависящую от времени, которая разложена по собственным функциям ψ_n ,

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \psi_n(x) e^{-in\omega t} e^{-i\omega t/2}. \quad (13.53)$$

Образует теперь функцию $P = \psi^* \psi$:

$$P = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} C_n^* C_m \psi_n^*(x) \psi_m(x) e^{i(n-m)\omega t}. \quad (13.54)$$

Все слагаемые в P или постоянны по времени, или колеблются гармонически с частотой, кратной основной частоте $\nu = \omega/2\pi$. Таким образом, значение волновой функции повторяется после прохождения основного периода. В результате волновой пакет не расплывается бесконечно, так как через каждый период он должен вернуться к первоначальной форме.

Так как для гармонического осциллятора частота колебаний каждого члена в уравнении (13.54) кратна частоте ν , то ясно, что возникает периодичность P (а также ω). Для любой системы, отличной от гармонического осциллятора, некоторые члены волновой функции должны колебаться с частотой, не кратной основной частоте, и функция не будет полностью периодической.

Следовательно, для гармонического осциллятора и только для него можно ожидать периодических волновых пакетов. Однако в общем случае даже в гармоническом осцилляторе форма волнового пакета не будет оставаться абсолютно постоянной по времени. Частный вид волнового пакета, который мы выбрали, является необычным в том смысле, что он имеет ту же волновую функцию, что и наименее состояние осциллятора, с тем лишь исключением, что его центр смещен на величину y_0 . Можно показать, что это свойство и обусловило постоянство формы P для нашего случая, но мы не будем здесь этого делать.

16. Средние значения кинетической и потенциальной энергий. Для получения среднего значения потенциальной энергии воспользуемся тождеством

$$y = \frac{1}{2} \left(y + \frac{d}{dy} \right) + \frac{1}{2} \left(y - \frac{d}{dy} \right), \quad (13.55a)$$

$$y^2 = \frac{1}{4} \left(y + \frac{d}{dy} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(y + \frac{d}{dy} \right) \left(y - \frac{d}{dy} \right) + \frac{1}{4} \left(y - \frac{d}{dy} \right) \left(y + \frac{d}{dy} \right). \quad (13.55b)$$

Заметим, что нужно быть осторожным при выборе порядка множителей в последнем члене; тогда получим

$$y^2 = \frac{1}{4} \left(y + \frac{d}{dy} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(y^2 - \frac{d^2}{dy^2} \right) \quad (13.55b)$$

и

$$\int \psi_n^* y^2 \psi_n dx = \int \psi_n^* \left[\frac{1}{4} \left(y + \frac{d}{dy} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(y^2 - \frac{d^2}{dy^2} \right) \right] \psi_n dy. \quad (13.56)$$

Воспользуемся теперь соотношениями

$$\left(y + \frac{d}{dy} \right)^2 \psi_n = 2 \sqrt{n(n-1)} \psi_{n-2},$$

$$\left(y - \frac{d}{dy} \right)^2 \psi_n = 2 \sqrt{(n+1)(n+2)} \psi_{n+2}$$

(см. уравнения (13.38) и (13.39)). Из ортогональности собственных функций, соответствующих различным n , мы видим, что первые два члена исчезают. Третий член как раз пропорционален энергии, так что

$$\bar{V} = \frac{\hbar\omega}{2} \bar{x}^2 = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right] \psi_n dx = \frac{E_n}{2}. \quad (13.57)$$

Мы видим, что среднее значение потенциальной энергии равно половине полной энергии, и так как $E = T + V$, то средняя кинетическая энергия также должна быть равна половине полной энергии. Этот же результат получается даже из классического гармонического осциллятора, если усреднить энергию по периоду.

Задача 2. Доказать, что $\bar{T} = \bar{V}$ для классического гармонического осциллятора.

Задача 3. Доказать, что среднее значение любой нечетной степени x или p равно нулю для любого собственного состояния осциллятора. Доказать, что оно не обязательно равно нулю для линейной комбинации первых двух собственных состояний.

Задача 4. Волновой пакет в уравнении (13.48) был так выбран, что его средний импульс равнялся нулю при $t = 0$. Предположим, что мы выбрали

$$[\psi(y)]_{t=0} = \exp\left(\frac{ip_0 x}{\hbar}\right) \exp\left[-\frac{1}{2}(y - y_0)^2\right],$$

где $x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} y$. Вычислить зависящую от времени волновую функцию для этого случая.

Задача 5. Методами, аналогичными тем, которые применялись при вычислении $\bar{x}^2$, вычислить $\bar{x}^4$ и $\bar{p}^4$ для случая $\psi = \psi_n(x)$, где n — произвольное собственное значение.

МОМЕНТ КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ И ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ В ТРЕХ ИЗМЕРЕНИЯХ

В этой главе мы рассмотрим решение волнового уравнения в трех измерениях. Здесь будет использован метод разделения переменных. В процессе решения задачи мы исследуем свойства операторов момента количества движения и шаровые функции, которые являются их собственными функциями. Особое внимание будет уделено возможности измерения различных составляющих момента количества движения и задаче орбит.

1. Разделение переменных. Начнем с описания метода разделения переменных. В трех измерениях волновое уравнение принимает вид

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi = 0. \quad (14.1)$$

Очень часто потенциал является только функцией расстояния от некоторого центра симметрии, который может быть, например, центром атома. В этом случае удобнее записать уравнение Шрёдингера в сферических полярных координатах r, ϑ, φ . В любой книге по теоретической физике (см., например, [38]) показывается, что оператор Лапласа, выраженный в этих координатах, принимает вид

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi. \quad (14.2)$$

Обозначим оператор в прямых скобках через Ω .

Если V является только функцией от r , то, как мы покажем, решение можно получить в виде произведения двух функций, одна из которых включает только радиус, а другая углы ϑ и φ . Чтобы получить такое решение, положим

$$\psi = v(r) Y(\vartheta, \varphi). \quad (14.3)$$

Тогда уравнение Шрёдингера примет вид

$$\left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [rv(r)] + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] v(r) \right\} Y(\vartheta, \varphi) + \frac{v(r)}{r^2} \Omega Y(\vartheta, \varphi) = 0. \quad (14.4)$$

Разделив (14.4) на $\frac{\psi}{r^2} = \frac{vY}{r^2}$, получаем

$$r^2 \left\{ \frac{1}{vr} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [rv(r)] + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] \right\} = - \frac{\Omega Y(\vartheta, \varphi)}{Y(\vartheta, \varphi)}.$$

В этом уравнении требуется, чтобы функция от r и функция от ϑ и φ по отдельности равнялись друг другу *при всех значениях* r, ϑ, φ . Это возможно только, когда каждая функция постоянна. Обозначим эту постоянную через $-c$. Тогда мы получим следующие два уравнения:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rv) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] v = - \frac{cv}{r^2}, \quad (14.5a)$$

$$\Omega Y(\vartheta, \varphi) = cY(\vartheta, \varphi). \quad (14.5b)$$

Если мы сможем получить физически допустимые решения этих двух уравнений, то произведение vY будет решением уравнения Шрёдингера. Мы увидим, что в общем случае допустимые решения возможны лишь при определенных значениях c и E и что произвольную функцию можно разложить в ряд по произведениям $v(r)Y(\vartheta, \varphi)$.

Однако разделение волновой функции на произведение функций от r и от ϑ и φ зависит от того, является ли V функцией только от r . Если V одновременно зависит от r и ϑ неразделимым образом, то невозможно такое разделение волновой функции.

Задача 1. Показать, что в сферических координатах разделение волновой функции на произведения функций возможно, если $V = f(r) + R(r)G(\vartheta, \varphi)$ при условии, что $R(r) = \frac{K}{r^2}$.

Очевидно, что в каждой задаче, в которой V является функцией только от радиуса, будем иметь дело с теми же угловыми функциями Y . Поэтому отложим рассмотрение радиального волнового уравнения до тех пор, пока мы не найдем решения для возможных значений c и соответствующих им собственных функций $Y(\vartheta, \varphi)$. Последнее можно сделать многими способами. Например, можно решить уравнение (14.5b) аналогично тому, как решалось волновое уравнение гармонического осциллятора. Здесь можно показать, что только при определенных значениях c получаются физически допустимые функции, которые называются «шаровыми функциями». Однако мы воспользуемся несколько более окольным путем, в котором яснее физическая картина и требуется более простой математический аппарат. Что касается более прямого метода, то читатель может познакомиться с ним в руководствах по квантовой теории (см., например, [10], стр. 118), электродинамике или математическому анализу.

2. Момент количества движения. Отметим сначала, что разделение переменных в уравнении Шрёдингера для сферических коор-

динат вполне аналогично следующей классической записи гамильтониана в сферических координатах:

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} \right) + V(r),$$

где p_r — радиальный импульс ($m\dot{r}$) и L — вектор момента количества движения. При сравнении с уравнением (14.4) замечаем, что L^2 входит в классическую функцию Гамильтона так же, как оператор $\hat{Q}$ входит в квантовомеханический оператор Гамильтона. Это указывает на то, что $\hat{Q}$ — оператор, соответствующий L^2 . Чтобы проверить, так это или нет, рассмотрим общие свойства операторов момента количества движения.

Три составляющих момента количества движения записываются так:

$$\left. \begin{aligned} L_z &= x p_y - y p_x, & L_x &= y p_z - z p_y, \\ L_y &= z p_x - x p_z, & L &= [r p]. \end{aligned} \right\} \quad (14.6)$$

Заметим, что L_y и L_z можно получить из L_x круговой перестановкой переменных x, y, z и p_x, p_y, p_z . В квантовой механике мы заменяем p_x на $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$; производя аналогичные замены для p_y и p_z , получаем

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right); \quad L_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right); \quad L_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (14.7)$$

Ясно, что все вышеприведенные операторы являются эрмитовскими.

3. Перестановочные соотношения для операторов момента количества движения. В результате непосредственных вычислений получаем

$$\begin{aligned} (L_x, L_y) &= (L_x L_y - L_y L_x) = -\hbar^2 \left[\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] = -\hbar^2 \left[y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right] = i\hbar L_x. \end{aligned} \quad (14.8a)$$

Круговая перестановка дает

$$(L_y, L_z) = i\hbar L_x, \quad (L_z, L_x) = i\hbar L_y. \quad (14.8b)$$

Вышеприведенные правила перестановки можно символически записать так*):

$$[LL] = i\hbar L. \quad (14.9)$$

*) Если L — численный вектор, то $[LL]$ должно равняться нулю. Но составляющие L суть операторы, которые не коммутируют, так что векторное произведение $[LL]$ не обязано исчезать.

Отметим, что две различные составляющие момента количества движения не коммутируют. Следовательно, в общем случае невозможно измерить все три величины L_x , L_y и L_z одновременно, поскольку, как показано в уравнении (10.13), произведение неопределенностей двух величин пропорционально среднему значению их коммутатора. К этому вопросу мы еще вернемся позже.

4. Полный момент количества движения. Абсолютное значение момента количества движения (или полный момент количества движения) $|L|$ определяется формулой

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2. \quad (14.10)$$

Представляет интерес получить перестановочные соотношения L^2 с компонентами L_x , L_y , L_z . Рассмотрим, например,

$$\begin{aligned} (L^2, L_z) &= (L^2 L_z - L_z L^2) = (L_x^2 + L_y^2) L_z - L_z (L_x^2 + L_y^2) = \\ &= L_x (L_x L_z - L_z L_x) + (L_x L_z - L_z L_x) L_x + \\ &\quad + L_y (L_y L_z - L_z L_y) + (L_y L_z - L_z L_y) L_y. \end{aligned}$$

Применяя перестановочные соотношения (14.8), получим

$$-i\hbar (L_x L_y + L_y L_x - L_y L_x - L_x L_y) = 0 = (L^2, L_z). \quad (14.11)$$

Итак, мы нашли, что L^2 коммутирует с L_z . Из соображений симметрии заключаем, что L^2 коммутирует также с L_x и L_y . Другими словами, можно одновременно измерить L^2 и любую одну из трех составляющих $\mathbf{L}$. Однако, поскольку составляющие L_x , L_y , L_z не коммутируют друг с другом, нельзя одновременно определить более чем одну из них.

5. Слагающие момента количества движения в полярных координатах. Здесь удобно перейти от декартовых составляющих вектора $\mathbf{L}$ к его составляющим в сферических полярных координатах. Вспомним, что

$$\left. \begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi, & y &= r \sin \vartheta \sin \varphi, & z &= r \cos \vartheta, \\ r^2 &= x^2 + y^2 + z^2, & \cos \vartheta &= \frac{z}{r}, & \operatorname{tg} \varphi &= \frac{y}{x}. \end{aligned} \right\} \quad (14.12)$$

Нам надо выразить $\partial/\partial x$, $\partial/\partial y$, $\partial/\partial z$ через $\partial/\partial r$, $\partial/\partial \varphi$, $\partial/\partial \vartheta$. Для этого потребуются следующие выражения, вывод которых предоставляется читателю в качестве упражнения:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial x} &= \sin \vartheta \cos \varphi, & \frac{\partial r}{\partial y} &= \sin \vartheta \sin \varphi, & \frac{\partial r}{\partial z} &= \cos \vartheta, \\ \frac{\partial \vartheta}{\partial x} &= \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi, & \frac{\partial \vartheta}{\partial y} &= \frac{1}{r} \cos \vartheta \sin \varphi, & \frac{\partial \vartheta}{\partial z} &= -\frac{1}{r} \sin \vartheta, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} &= -\frac{1}{r} \frac{\sin \varphi}{\sin \vartheta}, & \frac{\partial \varphi}{\partial y} &= \frac{1}{r} \frac{\cos \varphi}{\sin \vartheta}, & \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (14.13)$$

С учетом этих соотношений получаем

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \vartheta} \frac{\partial \vartheta}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \\ &= \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial f}{\partial \vartheta} - \frac{1}{r} \frac{\sin \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial f}{\partial \varphi}.\end{aligned}\quad (14.14)$$

Аналогичные выражения получаются для $\partial f/\partial y$ и $\partial f/\partial z$. В конце концов получаем

$$\left. \begin{aligned}L_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ L_x &= -\frac{\hbar}{i} \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{ctg} \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ L_y &= \frac{\hbar}{i} \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \operatorname{ctg} \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right).\end{aligned}\right\} \quad (14.15)$$

Задача 2. Доказать приведенные соотношения для $\partial r/\partial x$, $\partial \vartheta/\partial x$ и т. д., а также получить указанные результаты для L . Кроме того, доказать прямым дифференцированием, что $(L_x, L_y) = i\hbar L_z$.

Используя полученные результаты для L , можно вычислить L^2 в сферических полярных координатах

$$L^2 = -\hbar^2 \Omega, \quad (14.16)$$

где Ω — оператор, определяемый из уравнения (14.2). Поэтому задача нахождения возможных значений Ω аналогична определению собственных значений эрмитовского оператора L^2 . Уравнение Шрёдингера (14.4) можно переписать в следующем виде:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V \right] \psi = H\psi = E\psi. \quad (14.17)$$

6. Константы движения. Если V не является функцией ϑ и φ , то L^2 и L коммутируют с оператором Гамильтона. Покажем это. Из уравнения (14.17) замечаем, что теперь гамильтониан зависит от ϑ и φ только через оператор L^2 . Этот оператор коммутирует с L и, конечно, с L^2 , как и со всеми остальными частями гамильтониана. Поэтому можно определить одновременно три следующие величины:

- 1) собственное значение H (т. е. энергию);
- 2) собственное значение L^2 (т. е. квадрат полного момента количества движения);
- 3) собственное значение любой составляющей L (например, z -составляющую момента количества движения).

Так как L и L^2 коммутируют с H , то их средние значения не меняются со временем (см. уравнение (9.37)). Следовательно, L

и L^2 являются квантовомеханическими константами движения при $V = V(r)$, как и в классической механике. Однажды определенные собственные значения L^2 и одна из составляющих L уже не меняются со временем.

7. Собственные значения L_z . Ось z можно выбрать в любом произвольном направлении. Сделав это, попытаемся найти собственные функции L_z . Это значит, что надо решить уравнение

$$L_z \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = c \psi. \quad (14.18)$$

Его решение равно

$$\psi = e^{ic\varphi/\hbar} f(r, \vartheta), \quad (14.19)$$

где $f(r, \vartheta)$ — произвольная функция от r и ϑ .

Теперь ψ должна быть однозначной функцией от x, y, z , поэтому она должна быть периодичной по φ с периодом 2π . Это возможно только при $\frac{c}{\hbar} = m$, где m — целое число. Итак, собственные значения L_z равны*)

$$L_z = m\hbar. \quad (14.20)$$

Собственные функции равны

$$\psi = e^{im\varphi} f(r, \vartheta), \quad (14.21)$$

где $f(\vartheta, r)$ — произвольная функция ϑ и r .

8. Постулат разложения. Постулат разложения (см. гл. 10, п. 22) утверждает, что произвольную функцию можно разложить в ряд по собственным функциям эрмитовского оператора L_z . Мы видим, что это действительно так, поскольку произвольную однозначную функцию от x, y, z можно всегда представить как ряд Фурье с помощью функций (14.21).

9. Совместные собственные функции операторов L_z и L^2 . Подставим найденные выше собственные функции оператора L_z в уравнение, определяющее собственные функции оператора L^2 . Ис-

*) В гл. 17, п. 3 мы увидим, что в общем случае собственные значения оператора, соответствующего отдельной составляющей момента количества движения, могут быть или целыми, или полуцелыми числами, умноженными на $\hbar$. То, что для орбитальных моментов количества движения получаются только целочисленные множители перед $\hbar$, обусловлено требованиями однозначности волновой функции. Однако момент количества движения, возникающий из-за спина электрона, равен $\hbar/2$. Требование однозначности волновой функции не распространяется на спиновые переменные, которые больше связаны с «внутренними» свойствами электрона, чем с его пространственным положением.

пользуя уравнения (14.2) и (14.16), получим

$$\begin{aligned} L^2 e^{im\varphi} f(r, \vartheta) &= -\hbar^2 \Omega e^{im\varphi} f(r, \vartheta) = \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] e^{im\varphi} f(r, \vartheta) = \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right] e^{im\varphi} f(r, \vartheta) = c e^{im\varphi} f(r, \vartheta). \end{aligned}$$

Это приводит к дифференциальному уравнению, определяющему f :

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right] f = c f. \quad (14.22)$$

Собственные функции этого уравнения обозначим через $f_c^m(\vartheta)$. Ясно, что в этом случае произведения $\psi_c^m = f_c^m(\vartheta) e^{im\varphi}$ являются собственными функциями одновременно операторов L^2 и L_z . В соответствии с постулатом разложения произвольную функцию ψ можно разложить в ряд по собственным функциям f_c^m , так что произведения ψ_c^m можно представить как произвольную функцию от ϑ и φ .

10. Одновременное определение собственных функций и собственных значений L_z и L^2 . Теперь надо определить возможные значения L^2 и соответствующие им возможные собственные функции $f_c^m(\vartheta)$, когда

$$L_z = m\hbar^*).$$

Отметим сначала, что если L^2 имеет определенное численное значение, то эта величина не меняется, если подействовать на ψ операторами L_x , L_y или L_z . Для доказательства воспользуемся коммутруемостью любой из компонент $\mathbf{L}$ с L^2 . Итак, исходим из формулы

$$L^2 \psi = c \psi \quad (\text{для собственной функции}). \quad (14.23)$$

Действуя оператором любой компоненты $\mathbf{L}$, например L_z , получаем

$$L^2 L_z \psi = L_z L^2 \psi = L_z c \psi = c L_z \psi$$

или

$$L^2 (L_z \psi) = c (L_z \psi). \quad (14.24)$$

В результате, если ψ является собственной функцией L^2 , то $(L_z \psi)$ также является собственной функцией, принадлежащей *тому же самому собственному значению* L^2 . Это справедливо также для $(L_x \psi)$ и $(L_y \psi)$.

*) $L_z = m\hbar$ — стандартное сокращение записи $L_z \psi_m = m\hbar \psi_m$. Поскольку L_z имеет определенное значение, когда ψ_m является собственной функцией L_z , то эта запись имеет также следующее значение: перемещающая L_z равна $m\hbar$.

Предположим теперь, что $L_z \psi_m = \hbar m \psi_m$, т. е. что ψ_m — собственная функция одновременно для L^2 и L_z . Умножив вышеприведенное уравнение на оператор $(L_x + iL_y)$, получим

$$(L_x + iL_y) L_z \psi_m = \hbar m (L_x + iL_y) \psi_m. \quad (14.25)$$

Используя перестановочные соотношения (14.8), придем к следующему соотношению:

$$(L_x + iL_y) L_z - L_z (L_x + iL_y) = -\hbar (L_x + iL_y). \quad (14.26)$$

Уравнение (14.25) можно также переписать в таком виде:

$$L_z (L_x + iL_y) \psi_m = \hbar (m + 1) (L_x + iL_y) \psi_m. \quad (14.27)$$

Отсюда делаем вывод, что если ψ_m является собственной функцией, для которой $L_z = m\hbar$, то функция $(L_x + iL_y) \psi_m$ является тоже собственной функцией оператора L_z , принадлежащей другому собственному значению $L_z = (m + 1)\hbar$, но тому же самому собственному значению L^2 . Итак, исходя из заданной собственной функции, всегда можно получить новые собственные функции L_z , принадлежащие тому же самому собственному значению L^2 .

Аналогично можно показать, что

$$L_z (L_x - iL_y) \psi_m = \hbar (m - 1) (L_x - iL_y) \psi_m. \quad (14.28)$$

Поэтому оператор $L_x - iL_y$ уменьшает величину m на единицу, но не меняет L^2 .

Повторное применение оператора $L_x + iL_y$ позволяет получить собственные функции для фиксированного значения L^2 , принадлежащие бесконечно большим собственным значениям L_z , если только нет некоторого значения величины m , для которого $(L_x + iL_y) \psi_m$ исчезает. Аналогично повторное применение оператора $L_x - iL_y$ приводит к бесконечно большим отрицательным значениям m , если только $(L_x - iL_y) \psi_m$ не исчезает для некоторого значения функции ψ_m . Это положение подобно тому, с которым мы встречаемся в задаче гармонического осциллятора.

Мешает ли что-нибудь бесконечному возрастанию $|m|$ при фиксированной величине L^2 ? На этот вопрос следует ответить положительно, что видно из следующей очевидной формулы:

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = L_x^2 + L_y^2 + m^2 \hbar^2. \quad (14.29)$$

Теперь легко показать, что средние значения L_x^2 и L_y^2 должны быть всегда положительными.

Задача 3. Доказать, что среднее значение L_x^2 всегда положительно.

У к а з а н и е. Повернуть оси так, чтобы новая ось z была параллельна старой оси x . Тогда

$$L_x^2 = -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial \varphi^2}.$$

В состоянии, когда L^2 и L_z имеют определенные значения, должно выполняться следующее неравенство:

$$\hbar^2 m^2 \leq L^2. \quad (14.30)$$

Это означает, что $|\hbar m|$ не может быть больше, чем $\sqrt{L^2}$. Поэтому в состоянии, когда $|m|$ больше, чем это допустимо при заданном L^2 , должно быть либо

$$(L_x + iL_y)\psi_{m1} = 0, \quad \text{либо} \quad (L_x - iL_y)\psi_{m2} = 0,$$

где m_1 — максимальная положительная величина $L_z/\hbar$, допустимая при данном L^2 , а m_2 — максимальная отрицательная величина.

Для того чтобы найти связь между L^2 и m_1 и m_2 , рассмотрим выражение

$$\begin{aligned} L^2\psi_{m1} &= (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2)\psi_{m1} = [(L_x - iL_y)(L_x + iL_y) + L_z^2 + \hbar L_z]\psi_{m1} = \\ &= [(L_x - iL_y)(L_x + iL_y) + \hbar^2(m_1^2 + m_1)]\psi_{m1}. \end{aligned} \quad (14.31)$$

Так как

$$(L_x + iL_y)\psi_{m1} = 0, \quad (14.32)$$

то

$$L^2\psi_{m1} = \hbar^2 m_1(m_1 + 1)\psi_{m1}. \quad (14.33)$$

Подобным путем легко показать, что если $(L_x - iL_y)\psi_{m2} = 0$, то имеет место равенство

$$L^2\psi_{m2} = \hbar^2 m_2(m_2 - 1)\psi_{m2}. \quad (14.34)$$

Если уравнения (14.33) и (14.34) справедливы одновременно, то должно быть *) $m_2 = -m_1$. Другими словами, максимальным отрицательным значением m является отрицательное значение его максимальной положительной величины.

Обычно обозначают m_1 целым числом l . В этих обозначениях имеем

$$L^2 = \hbar^2 l(l + 1). \quad (14.35)$$

Для любого заданного значения l возможные значения m являются любым положительным или отрицательным целым числом между $\pm l$, включая и нуль.

11. Векторное изображение возможных значений моментов количества движения. Рассмотрим случай, когда l есть некоторое фиксированное число. Тогда полный момент количества движения

*) Другое решение: $m_2 = m_1 + 1$, но оно недопустимо, поскольку по предположению m_1 есть наибольшая положительная величина $L_z/\hbar$.

можно изобразить вектором длиной

$$\frac{L}{\hbar} = \sqrt{l(l+1)}. \quad (14.36)$$

Составляющая m в направлении z может быть любым целым числом от $+l$ до $-l$ включительно. Число m называется «азимутальным квантовым числом», а l — «квантовым числом полного момента» *).

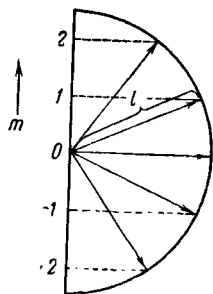


Рис. 66.

Возможные значения составляющих m момента количества движения можно изобразить схематически как проекции вектора $L/\hbar$ на ось z . Векторная диаграмма на рис. 66 иллюстрирует возможные состояния для $l=2$ и $L/\hbar = \sqrt{6} = 2,5$. Поскольку известно, что на L_x и L_y наложено лишь условие $L_x^2 + L_y^2 = L^2 - m^2\hbar^2$, то можно рассматривать этот вектор случайно ориентированным по всей области азимутальных углов, совместимых с известными значениями проекций L на ось z . Поэтому считают, что вектор L описывает конус**), угол которого определяется выражением

$$\cos \vartheta = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}.$$

12. Флуктуации в ориентациях вектора L . Важно отметить, что, даже когда $m = \pm l$, вектор момента количества движения не ориентирован точно вдоль оси z , а имеет неисчезающие x - и y -компоненты, которые не полностью определимы. Это связано с тем, что L_x и L_y не коммутируют с L_z , поэтому они не могут быть равными нулю в состоянии, в котором L_z имеет определенное значение. Следовательно, неизбежно наличие некоторых флуктуаций L_x и L_y , которые добавляются к $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$. При описании этих флуктуаций количественно прежде всего отметим, что, когда волновая функция является собственной функцией L^2 и L_z , средние значения L_x и L_y равны нулю. Это соответствует тому, что L описывает конус ориентаций, ось которого направлена по z . Поэтому флуктуации L_x и L_y соответственно равны

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta L_x)^2} &= \overline{(L_x - \bar{L}_x)^2} = \bar{L}_x^2 - (\bar{L})^2 = \bar{L}_x^2, \\ \overline{(\Delta L_y)^2} &= \overline{(L_y - \bar{L}_y)^2} = \bar{L}_y^2 - (\bar{L})^2 = \bar{L}_y^2. \end{aligned}$$

*) В нашей литературе по квантовой механике m называется магнитным квантовым числом, а l — азимутальным или орбитальным квантовым числом. — Прим. ред.

**) Таким образом, в классическом смысле вектор L определен с точностью до прецессии вокруг оси z под углом ϑ . — Прим. ред.

Это дает

$$\overline{L^2} = \overline{L_x^2} + \overline{L_y^2} = (\overline{\Delta L_x})^2 + (\overline{\Delta L_y})^2 + \hbar^2 m^2 = \hbar^2 l(l+1)$$

или

$$(\overline{\Delta L_x})^2 + (\overline{\Delta L_y})^2 = \hbar^2 (l^2 + l - m^2). \quad (14.37)$$

Из этого видно, что флуктуация слагающих вектора $\mathbf{L}$, которые перпендикулярны к z , будет минимальна при $m=l$. Поэтому получаем

$$[(\overline{\Delta L_x})^2 + (\overline{\Delta L_y})^2]_{\min} = l\hbar^2.$$

Грубо говоря, это означает, что минимальный угол между направлениями вектора $\mathbf{L}$ и оси z равен

$$\sin \vartheta_{\min} = \frac{\sqrt{l}}{\sqrt{l(l+1)}} = \frac{1}{\sqrt{l+1}}. \quad (14.38)$$

Однако неправильно представить себе, что вектор момента количества движения направлен в некотором определенном направлении, которое мы не можем точно определить. В действительности, когда L^2 и L_z имеют определенные значения, надо представить себе что весь конус ориентаций, соответствующий этим значениям L_x и L_y , которые совместимы с данными L^2 и L_z , покрывается одновременно. На это указывает то, что из эффектов интерференции волновых функций, соответствующих различным компонентам момента, можно получить важные физические следствия (см. пп. 17 и 18).

В пределе (при больших квантовых числах) $\vartheta_{\min}$ становится очень маленьким, и тогда вектор момента количества движения можно считать достаточно точно ориентированным в определенном направлении*).

13. Собственные функции операторов L^2 и L_z . Можно найти собственные функции методом, подобным тому, который использовался для гармонического осциллятора. Если мы получим одну собственную функцию для этих двух операторов, то все остальные собственные функции, соответствующие тому же значению L^2 , можно получить повторным применением операторов $(L_x + iL_y)$ и $(L_x - iL_y)$. Однако первую собственную функцию, соответствующую $m=l$,

*) Здесь следует предостеречь от слишком далеко идущих классических аналогий. Всегда нужно помнить, что микрочастица качественно отлична от макротел, и поэтому ее момент количества движения (а также его составляющие) качественно отличен от соответствующих классических понятий. — *Прим. ред.*

можно получить из условия (14.32)

$$(L_x + iL_y)\psi_l^l = 0^*).$$
 (14.39)

Из уравнений (14.15) выражаем L_x и L_y через ϑ и φ и получаем

$$L_x + iL_y = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right).$$
 (14.40)

Для $m=l$ имеем $\psi_l^l = f_l^l(\vartheta) e^{il\varphi}$, тогда $i \frac{\partial \psi_l^l}{\partial \varphi} = -l\psi_l^l$. Уравнение (14.39) принимает вид

$$\frac{\partial \psi_l^l}{\partial \vartheta} = l \operatorname{ctg} \vartheta \psi_l^l.$$

Интегрирование дает

$$\ln \psi_l^l = l \ln (\sin \vartheta) + k(\varphi) \quad \text{или} \quad \psi_l^l = g(\varphi) (\sin \vartheta)^l. \quad (14.41)$$

Здесь $g(\varphi)$ — произвольная функция от φ , но ее надо выбрать так, чтобы ψ_l^l была собственной функцией оператора L_z с собственным значением $\hbar l$. А это значит, что $g(\varphi) = e^{il\varphi}$, таким образом,

$$\psi_l^l = e^{il\varphi} (\sin \vartheta)^l. \quad (14.42)$$

Для получения функций ψ_l^m , соответствующих меньшим значениям m , надо подействовать оператором $(L_x - iL_y)$. Из уравнения (14.15) получаем

$$-(L_x - iL_y) = \hbar e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} - i \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (14.43)$$

С помощью соотношения $-i \frac{\partial \psi_l^l}{\partial \varphi} = l\psi_l^l$ получаем

$$\psi_l^{l-1} - (L_x - iL_y)\psi_l^l = \hbar e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \operatorname{ctg} \vartheta \right) \psi_l^l. \quad (14.44)$$

Используя соотношение

$$\left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \operatorname{ctg} \vartheta \right) \psi_l^l = \frac{1}{(\sin \vartheta)^l} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta)^l \psi_l^l \right],$$

получим**)

$$\psi_l^{l-1} = \frac{1}{(\sin \vartheta)^l} e^{i(l-1)\varphi} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta)^{2l}. \quad (14.45)$$

*) Обозначение ψ_l^m означает, что $\frac{L_z}{\hbar} = m$, $\frac{L^2}{\hbar^2} = l(l+1)$.

**) Мы пренебрегаем множителями $\hbar$ и знаками $-$, так как их можно считать включенными в нормировочный коэффициент.

Найдем функцию ψ_l^{l-2} ; при этом заметим, что

$$(L_x - iL_y)\psi_l^{l-1} = e^{-i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \vartheta} + (l-1) \operatorname{ctg} \vartheta \right] \psi_l^{l-1} = \\ = \frac{e^{-i\varphi}}{(\sin \vartheta)^{l-1}} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta)^{l-1} \psi_l^{l-1}.$$

Итак, получаем

$$\psi_l^{l-2} = \frac{1}{(\sin \vartheta)^{l-1}} e^{i(l-2)\varphi} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left[\frac{\frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta)^{2l}}{\sin \vartheta} \right].$$

Повторное применение оператора $(L_x - iL_y)$ дает

$$\psi_l^{l-s} = \frac{e^{i(l-s)\varphi}}{(\sin \vartheta)^{l-s}} \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right)^s (\sin \vartheta)^{2l}. \quad (14.46)$$

Результат можно упростить, если использовать подстановки

$$\cos \vartheta = \zeta, \quad \frac{\partial}{\partial \vartheta} = -\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \zeta}.$$

В результате получаем

$$\psi_l^{l-s} = \frac{e^{i(l-s)\varphi}}{(1-\zeta^2)^{(l-s)/2}} \frac{\partial^s}{\partial \zeta^s} (1-\zeta^2)^l. \quad (14.47)$$

Это суть ненормированные собственные функции операторов L_z и L^2 .

14. Полиномы Лежандра. Начнем исследование этих собственных функций для частного случая $l=s$. В этом случае z -составляющая момента количества движения равна нулю

$$\psi_l^0 = \frac{\partial^l}{\partial \zeta^l} (1-\zeta^2)^l. \quad (14.48a)$$

Поскольку $L_z=0$, эти функции не содержат φ . Так как $(1-\zeta^2)^l$ — полином степени $2l$ и так как каждое дифференцирование понижает степень полинома на единицу, то, очевидно, что ψ_l^0 — полином степени l . Эти полиномы называются полиномами Лежандра (с точностью до постоянного множителя) и обозначаются так; $P_l(\zeta)$; таким образом, мы получаем

$$\psi_l^0 \sim P_l(\zeta) \sim \frac{d^l}{d\zeta^l} (1-\zeta^2)^l. \quad (14.48b)$$

Перечислим некоторые свойства полиномов Лежандра:

1) *Ортогональность.* Поскольку полиномы Лежандра являются собственными функциями эрмитовских операторов L_z и L^2 , принадлежащими различным собственным значениям L^2 , то можно ожидать, что полиномы с различными l ортогональны (см. гл. 10, п. 24). Так

как полиномы не являются функциями радиуса, то интегрировать необходимо просто по телесному углу, тогда

$$\int P_l(\cos \vartheta) P_m(\cos \vartheta) d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi P_l(\cos \vartheta) P_m(\cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta.$$

Замечая, что

$$\sin \vartheta d\vartheta = -d\zeta,$$

получим

$$\int_{-1}^1 P_l(\zeta) P_m(\zeta) d\zeta = 0 \quad (14.49)$$

при $l \neq m$. Этот вывод можно доказать и непосредственно из определения P_l (уравнение (14.486)).

Задача 4. Доказать непосредственно ортогональность различных полиномов Лежандра.

У к а з а н и е. Учесть, что $l > m$ и интегрировать по частям l раз.

2) *Дифференциальное уравнение для полиномов Лежандра.* Мы показали, что полином Лежандра степени l удовлетворяет уравнению

$$L^2 P_l = h^2 l(l+1) P_l,$$

где L^2 определяется уравнениями (14.2) и (14.16). Так как P_l не является функцией от φ , то член, содержащий $\partial/\partial\varphi$, исчезает. Мы получаем

$$-\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial P_l}{\partial \vartheta} \right) = l(l+1) P_l. \quad (14.50)$$

Полагая $\cos \vartheta = \zeta$, находим

$$\frac{d}{d\zeta} \left[(1 - \zeta^2) \frac{dP_l}{d\zeta} \right] + l(l+1) P_l = 0. \quad (14.51)$$

Это уравнение Лежандра. Полиномы Лежандра обычно получают, решая это уравнение (см., например, [39], стр. 273) и выбирая только те решения, которые являются регулярными в интервале $-1 \leq \zeta \leq 1$.

3) *Нормировка полиномов Лежандра.* Полиномы Лежандра можно нормировать методами, подобными тем, которые использовались для полиномов Эрмита — Чебышева. Здесь мы только приведем результаты. $P_n(\zeta)$ обычно определяется следующим образом ([39], стр. 275):

$$P_n(\zeta) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{d\zeta^n} (\zeta^2 - 1)^n \quad (\text{формула Родригеса}). \quad (14.52)$$

При этом определении нормировку можно получить из соотношений

$$\int_{-1}^1 |P_n(\zeta)|^2 d\zeta = \frac{2}{2n+1}. \quad (14.52a)$$

4) *Производящая функция для полиномов Лежандра.* Как и в случае полиномов Эрмита — Чебышева, можно получить производящую функцию для полиномов Лежандра ([39], стр. 277). Однако здесь мы не будем этого делать, а просто приведем результат

$$V = \sum_0^{\infty} t^n P_n(\zeta) = \frac{1}{[1 - 2t\zeta + t^2]^{1/2}}. \quad (14.53)$$

5) *Рекуррентные формулы.* Из этой функции можно получить рекуррентные формулы. Например, продифференцируем ее по t . После небольших преобразований найдем следующее уравнение:

$$(1 - 2\zeta t + t^2) \sum_{n=0}^{\infty} n t^{n-1} P_n(\zeta) = (\zeta - t) \sum_0^{\infty} t^n P_n(\zeta).$$

Приравнивание коэффициентов при t^n приводит к формуле

$$(n+1)P_{n+1}(\zeta) - (2n+1)\zeta P_n(\zeta) + nP_{n-1}(\zeta) = 0. \quad (14.54a)$$

Аналогично из соотношения

$$t \frac{\partial V}{\partial t} = (\zeta - t) \frac{\partial V}{\partial \zeta}$$

получаем

$$\zeta \frac{dP_n}{d\zeta} - \frac{dP_{n-1}}{d\zeta} = nP_n. \quad (14.54b)$$

Тем же путем можно получить и другие формулы.

6) *Первые несколько полиномов Лежандра.* Из уравнения (14.52) находим

$$P_0(\zeta) = 1, \quad P_1(\zeta) = \zeta, \quad P_2(\zeta) = \frac{3\zeta^2 - 1}{2}. \quad (14.55)$$

7) *Постулат разложения.* Все полиномы Лежандра являются собственными функциями операторов L_z и L^2 , принадлежащими собственному значению $L_z = 0$. Тогда, согласно постулату разложения (гл. 10, п. 22), произвольная функция от

$$\zeta = \cos \vartheta$$

может быть разложена в ряд по полиномам Лежандра. Таким образом,

$$f(\zeta) = \sum_n c_n P_n(\zeta). \quad (14.56)$$

Чтобы получить c_m при заданной функции $f(\zeta)$, умножим (14.56) на $P_m(\zeta)$ и проинтегрируем по ζ от -1 до $+1$, используя ортогональность и нормировку $P_n(\zeta)$. В результате получаем

$$c_m = \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_m(\zeta) f(\zeta) d\zeta. \quad (14.57)$$

8) *Узлы полиномов Лежандра.* Поскольку $P_l(\zeta)$ есть полином степени l , он должен иметь l нулей. Можно показать*), что все эти нули лежат между $\zeta = -1$ и $\zeta = +1$. Поэтому волновая функция колеблется l раз между углами $\vartheta = 0$ и $\vartheta = \pi$.

15. Присоединенные функции Лежандра. Полиномы Лежандра являются собственными функциями оператора L^2 при $L_z = m\hbar = 0$. Собственные функции для других значений m находятся из уравнения (14.47). Обозначим собственные функции, принадлежащие $L^2 = l(l+1)\hbar$ и $L_z = m\hbar$ через $P_l^m(\zeta)$; тогда полная волновая функция равна $P_l^m(\zeta) e^{im\varphi}$.

Иное выражение для $P_l^m(\zeta)$ можно получить из разложения, данного в уравнении (14.47). Мы нашли, что ψ_l^0 соответствует $L_z = m\hbar = 0$. Подставим теперь $m = l - s$ в уравнение (14.47)

$$\psi_l^m = \frac{e^{im\varphi}}{(1-\zeta^2)^{m/2}} \frac{\partial^{l-m}}{\partial \zeta^{l-m}} (1-\zeta^2)^l. \quad (14.58)$$

Если рассматривать отрицательные значения m , то можно использовать уравнение (14.48a), что дает

$$\psi_l^{-m} \sim e^{-im\varphi} (1-\zeta^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\zeta^m} P_l(\zeta). \quad (14.59)$$

Это означает, что

$$P_l^{-m}(\zeta) = (1-\zeta^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\zeta^m} P_l(\zeta). \quad (14.60)$$

Поскольку в п. 13 мы могли выбрать $m = -l$ с тем же основанием, что и $m = l$, то можно также получить

$$\psi_l^m \sim e^{im\varphi} P_l^m(\zeta). \quad (14.61)$$

$P_l^m(\zeta)$ называют «присоединенными функциями Лежандра». Отметим, что

$$P_l^{-m}(\zeta) = P_l^m(\zeta).$$

*) Согласно формуле (14.48b), видно, что $P_l(\zeta)$ есть l -я производная функции, которая имеет нули l -го порядка при $\zeta = +1$ и $\zeta = -1$. Первая производная должна тогда иметь нуль между $+1$ и -1 ; вторая производная, как можно легко проверить, имеет два нуля, а l -я производная — l нулей.

Перечислим некоторые важные свойства присоединенных функций Лежандра:

1) *Нормировка*. Нормировочный коэффициент для функции $P_l^m(\zeta)$ можно получить из соотношения, которое здесь приводится без доказательства ([39], стр. 281):

$$\int_{-1}^1 [P_l^m(\zeta)]^2 d\zeta = \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} \frac{2}{2l+1}. \quad (14.62)$$

2) *Поверхностные гармоники*. В соответствии с постулатом разложения наиболее общую функцию ϑ или φ можно представить в виде ряда по функциям

$$P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}.$$

Эти функции одновременно являются собственными функциями коммутирующих операторов L^2 и L_z , и так как они не вырождены (ибо или l , или m различны для каждой функции), то все они ортогональны. Нормированные функции обозначаются через $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$. Поэтому для произвольной функции имеем

$$\psi(\vartheta, \varphi) = \sum_{l, m} c_l^m Y_l^m(\vartheta, \varphi). \quad (14.63)$$

Чтобы вычислить c_r^s , умножим (14.63) на Y_r^{s*} и проинтегрируем по телесному углу, используя свойства ортогональности и нормировки

$$c_r^s = \int \psi(\vartheta, \varphi) Y_r^{s*}(\vartheta, \varphi) d\Omega, \quad (14.64)$$

где

$$d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi.$$

3) *Дифференциальное уравнение для определения присоединенных функций Лежандра*. Так как $P_l^m(\zeta) e^{im\varphi}$ является собственной функцией оператора $L^2/\hbar^2$ с собственным значением $l(l+1)$ и оператора $L_z/\hbar$ с собственным значением m , то она должна удовлетворять уравнению

$$L^2 P_l^m(\zeta) e^{im\varphi} = \hbar^2 l(l+1) P_l^m(\zeta) e^{im\varphi}.$$

Оператор L^2 получен из уравнений (14.2) и (14.16) при условии

$$\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} e^{im\varphi} = -m^2 e^{im\varphi}.$$

Окончательно уравнение имеет вид

$$\frac{d}{d\zeta} \left[(1-\zeta^2) \frac{dP_l^m(\zeta)}{d\zeta} \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-\zeta^2} \right] P_l^m(\zeta) = 0. \quad (14.65)$$

Присоединенные функции Лежандра часто получают путем решения этого уравнения и нахождения его собственных значений (см., например, [10], стр. 131).

4) *Общая форма функций $P_l^m(\zeta)$.* Мы уже видели, что $P_l(\zeta)$ — это просто полиномы, имеющие l корней в интервале от $\zeta = -1$ до $\zeta = +1$. Из уравнения (14.58) видно, что функция $P_l^m(\zeta)$ равна произведению полинома $\left[\frac{d^m}{d\zeta^m} P_l(\zeta) \right]$ степени $l - m$ на множитель $(1 - \zeta^2)^{m/2} = (\sin \vartheta)^m$. Читатель может легко проверить (см. примечание на стр. 378), что этот полином имеет $l - m$ корней в интервале от $\zeta = -1$ до 1 ; следовательно, функция колеблется не так часто, как при $m = 0$. Множитель $(\sin \vartheta)^m$ стремится увеличить функцию при $\vartheta = \pi/2$, т. е. в экваториальной плоскости. Чем больше m , тем острее этот максимум. Действительно, при $m = l$ из уравнения (14.58) следует

$$P_l^m(\zeta) \sim (1 - \zeta^2)^{m/2} = (\sin \vartheta)^m. \quad (14.66)$$

При большом m функция имеет острый максимум при $\vartheta = \pi/2$. Физически это значит, что частица стремится находиться вблизи экваториальной плоскости. По мере приближения к классическому пределу больших чисел m этот максимум становится все острее и острее, так что при $l = m$ частица как бы вращается по орбите, которая почти точно находится в экваториальной плоскости. Однако в положении орбиты остаются небольшие флуктуации, которые обуславливаются тем, что если z -составляющая момента количества движения определена, то x - и y -составляющие невозможно точно определить.

Если при заданном l убывает m , то роль множителя $(\sin \vartheta)^m$ уменьшается, максимум становится менее острым и, наконец, при $m = 0$, как мы видели, волновая функция почти равномерна относительно всех значений ϑ . В процессе уменьшения m при фиксированном значении l направление полного момента количества движения удаляется от оси z . Можно сказать, что в классическом пределе орбита отклоняется от экваториальной плоскости (орбита всегда нормальна к L). Но при квантовом описании нет преимущественных отдельных направлений L_x и L_y . Поэтому следует рассматривать систему распределенной по всем возможным значениям L_x и L_y , совместимым с данными значениями l и m . Это означает, что частицу можно найти внутри некоторого интервала углов ϑ , который возрастает с убыванием m . При достижении значения $m = 0$ плоскость орбиты нормальна к экваториальной плоскости, и частица размазана по всем значениям ϑ .

Как было указано в п. 12, направления орбитальной плоскости и вектора момента количества движения (который в классической физике перпендикулярен к этой плоскости) нужно рассматривать как

не полностью определенные в том смысле, что частица распределена одновременно по всем направлениям. Это следует из нашей общей интерпретации волновой функции, согласно которой интерференционные свойства, зависящие от волновых функций при различных углах, указывают границы применимости результатов, имеющих физическое значение.

5) Число узлов функций $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$. Как было показано, $P_l^m(\zeta)$ имеет $l - m$ нулей. Каждый из этих нулей определяет узловой конус, соответствующий постоянной широте. Если рассмотреть вещественную часть полной угловой волновой функции $P_l^m(\zeta) \cos m\varphi$, то увидим, что $\cos m\varphi = 0$ определяет m узловых плоскостей. Тогда полное число узловых плоскостей равно

$$l - m + m = l.$$

Это — полезное замечание, на которое мы будем ссылаться позже.

16. Измерение момента количества движения. Опыт Штерна и Герлаха. Один из способов измерения момента количества движения — это опыт Штерна и Герлаха ([11], стр. 407). Предположим, что требуется измерить момент количества движения электронов в атоме данного типа, например в атоме магния. Пучок таких атомов получается, в частности, при испарении с твердого тела и пропускании испаренных атомов через ряд коллимирующих щелей. Этот пучок попадает в область с неоднородным магнитным полем, нормальным к направлению движения атомов. Схема этого опыта *) показана

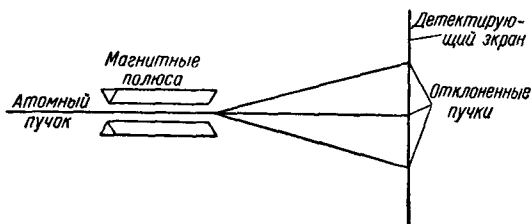


Рис. 67.

на рис. 67. Если электроны вращаются по орбитам, на которых их момент количества движения равен L , то магнитный момент этих электронов будет (см. уравнение (15.52))

$$\mu = \frac{eL}{2mc}. \quad (14.67)$$

*) Длина магнита (в направлении x) гораздо больше, чем расстояние между полюсами (в направлении z), поэтому можно пренебречь краевыми эффектами, и задача становится двумерной.

В неоднородном магнитном поле на атомы действует сила

$$\mathbf{F} = \text{grad}(\mu \mathcal{H}), \quad (14.68)$$

где $\mathcal{H}$ — магнитное поле. Поскольку $\partial \mathcal{H}_z / \partial z$ обычно мало, получаем

$$F_z \simeq \mu_z \frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial z} = \frac{e}{2mc} \frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial z} L_z. \quad (14.69)$$

Поэтому каждый атом подвергается действию силы, пропорциональной z -составляющей момента количества движения его электронов (относительно центра атома). В результате атом приобретает соответствующий импульс, а пучок соответственно отклоняется. Пучок собирается на некотором расстоянии от магнита в точке, достаточно удаленной для того, чтобы разделить атомы с разными L_z . Измерив отклонение, можно рассчитать L_z .

Поскольку перед тем, как атомы попадают в магнитное поле, нет предпочтительных ориентаций L_z , то очевидно, что атомы с каждым возможным значением L_z будут встречаться одинаково часто и беспорядочным образом по мере их испарения с металла. Поэтому на экране получается по одному пятну для каждого из возможных значений L_z . Так как полное число возможных значений составляющих L_z равно $2l + 1$, то можно определить l простым подсчетом пятен на экране. [Этот метод применяется только к тем атомам, для которых полный спин электрона равен нулю. Влияние спина может изменить число и распределение пятен (о влиянии спина см. гл. 17). Фактически этот опыт дает возможность показать наличие спина электрона, поскольку во многих случаях распределение пятен оказывается отличным от предсказанного выше.]

Надо отметить, что опыт Штерна и Герлаха дает прямое доказательство квантовой природы момента количества движения, поскольку по классической теории должен быть непрерывный ряд значений моментов количества движения и, следовательно, непрерывный ряд точек на экране, в которые попадают атомы.

17. Преобразование к вращающейся системе осей. В п. 7 было показано, что в качестве оси z можно выбрать произвольное направление. На первый взгляд кажется, что выбранная ось имеет какое-то особое значение, поскольку в ее направлении — и ни в каком другом — квантуется момент количества движения. Однако мы покажем, что, несмотря на квантование только одной составляющей момента количества движения, ни один из результатов, имеющий физический смысл, не зависит от выбора оси. Для доказательства этого покажем, что можно получить ту же самую волновую функцию и, следовательно, те же самые вероятности для всех физических величин, имея дело с системой координат, в которой оси повернуты на произвольный угол относительно первоначальных осей.

Начнем со случая, когда момент количества движения равен нулю ($L^2=0$). Тогда также $L_z=0$, а волновая функция даже не является функцией от ϑ и φ (см. уравнение (14.16)). Это означает, что если повернуть координатные оси, то волновая функция не меняется, и в новой системе координат она по-прежнему соответствует собственным значениям $L^2=0$ и $L_z=0$. Поэтому ясно, что в этом случае никакие физические результаты не зависят от выбора осей.

Для больших значений момента количества движения остается справедливым вывод, что L^2 не меняется при повороте осей. Это следует из того, что L^2 — скаляр. Поэтому величина l не меняется. Однако можно ожидать, что изменяется составляющая момента количества движения. Чтобы показать, каковы эти изменения, рассмотрим случай $l=1$. В первоначальной системе координат тремя нормированными волновыми функциями являются следующие (см. уравнения (14.47) и (14.62)):

$$\left. \begin{aligned} m=1 \quad \psi_1 &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}, \\ m=0 \quad \psi_0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta, \\ m=-1 \quad \psi_{-1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{-i\varphi}. \end{aligned} \right\} \quad (14.70)$$

Для иллюстрации рассмотрим поворот на угол β около оси y . При этом удобно выразить волновые функции следующим образом:

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{(x+iy)}{r}; \quad \psi_0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}; \quad \psi_{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{(x-iy)}{r}. \quad (14.71)$$

Старые координаты связаны с новыми соотношениями

$$\begin{aligned} y &= y', \quad z = z' \cos \beta - x' \sin \beta; \\ x &= z' \sin \beta + x' \cos \beta, \quad r' = r. \end{aligned}$$

Тогда получаем

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{1}{r} (x' \cos \beta + z' \sin \beta + iy') = \\ &= \frac{1}{2} \psi'_1 (1 + \cos \beta) + \frac{\psi'_0 \sin \beta}{\sqrt{2}} + \psi'_{-1} \frac{(\cos \beta - 1)}{2}, \\ \psi_0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{1}{r} (z' \cos \beta - x' \sin \beta) = \\ &= -\psi'_1 \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} + \psi'_0 \cos \beta - \psi'_{-1} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}}, \\ \psi_{-1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{1}{r} (x' + z' \sin \beta - iy') = \\ &= \psi'_1 \frac{(\cos \beta - 1)}{2} + \frac{\psi'_0 \sin \beta}{\sqrt{2}} + \psi'_{-1} \frac{(\cos \beta + 1)}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (14.72)$$

Это означает, что в новой системе координат каждая функция ψ_m становится линейной комбинацией собственных функций $L_{z'}$. Например, если в старой системе координат $L_z = 0$, то в новой системе $L_{z'}$ может быть равно $+1$, 0 и -1 . Относительные вероятности осуществления этих значений определяются коэффициентами соответствующих волновых функций. Таким образом, получаем

$$P_{+1} = \frac{\sin^2 \beta}{2}; \quad P_0 = \cos^2 \beta; \quad P_{-1} = \frac{\sin^2 \beta}{2}. \quad (14.73)$$

Сумма этих вероятностей, как и должно быть, равняется единице.

Задача 5. Доказать, что собственное значение L^2 не меняется при преобразовании (14.72).

Представляет интерес рассмотреть частный случай, когда $\beta = 90^\circ$. В этом случае $P_{+1} = 1/2$, $P_{-1} = 1/2$, так что частица, у которой в старой системе $L_z = 0$, при измерении в новой системе имеет с равной вероятностью $L_{z'} = +1$ или $L_{z'} = -1$. Но так как z' (в новой системе) то же самое, что и x в старой системе, то можно сделать вывод, что частица, у которой $L_z = 0$, при измерении имеет с равной вероятностью $L_x = +1$ или $L_x = -1$.

Заметим, что собственная функция для $L_z = 0$ образуется интерференцией двух различных собственных функций L_x . Из этого следует вывод, что нулевое значение L_z является взаимным (или интерференционным) свойством двух состояний $L_x = 1$ и $L_x = -1$. Поэтому частицу с $L_z = 0$ нельзя рассматривать как имеющую определенное значение L_x , вместо этого ее надо рассматривать как находящуюся одновременно в двух состояниях. Это — другой способ выражения факта, что наблюдаемые величины L_x и L_z нельзя измерить одновременно, факта, который уже был получен из некоммутативности операторов L_x и L_z .

Теперь можно выяснить, что происходит с волновой функцией частицы, для которой $L_z = 0$, когда измеряется L_x . Волновая функция распадается на две части (см. гл. 6, п. 3 и гл. 22, п. 9), каждая из которых соответствует определенному значению L_x и содержит неопределенный фазовый множитель $e^{i\alpha}$, что уничтожает условия когерентности для интерференции. Следовательно, перед измерением L_x волновая функция при подстановке $\beta = \pi/2$ равна (см. уравнения (14.72))

$$\psi_0 = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi'_1 + \psi'_{-1}). \quad (14.74)$$

После измерения она равна

$$\psi_0 = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi'_1 e^{i\alpha_1} + \psi'_{-1} e^{i\alpha_2}). \quad (14.75)$$

Хотя значение L_x было определено (она равна или $+1$, или -1) действием измерительной аппаратуры, значение L_z нельзя определить; например, $L_z = 0$ только тогда, когда волновая функция

$$\psi_0 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi'_1 + \psi'_{-1}).$$

Итак, после измерения мы имеем смесь двух значений L_z . Вообще из сказанного выше ясно, что волновая функция, соответствующая определенному значению L_z , имеет такую структуру, что L_x невозможно определить, если L_z имеет собственное значение, и наоборот.

18. Двойной опыт Штерна и Герлаха. Измерение, описанное в п. 17, можно осуществить экспериментально с помощью двойного опыта Штерна и Герлаха. Предположим, что мы направляем пучок атомов через неоднородное магнитное поле, ориентированное вдоль оси z , и таким образом разделяем частицы в соответствии с их значениями L_z . Затем можно выбрать отдельный пучок, например тот, для которого $L_z = 0$, и направить его через второй магнит,

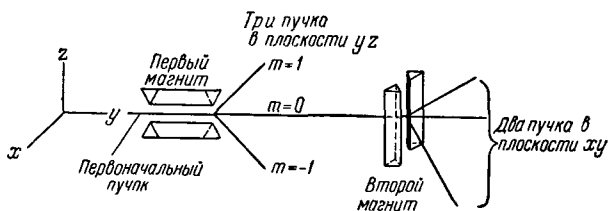


Рис. 68.

магнитное поле которого перпендикулярно к полю первого магнита. Этот пучок должен расщепляться (см. п. 17) на два, с $L_x = +1$ и с $L_x = -1$ (но для каждого из них L_z неопределено). Схема этого опыта показана на рис. 68.

Аналогичные результаты можно вывести для случая $m = \pm 1$.

Задача 6. Рассмотреть, что происходит в двойном опыте Штерна и Герлаха с частицами, у которых $m = 1$ при $\beta = 90^\circ$ и при $\beta = 45^\circ$.

19. Физическая эквивалентность всех систем координат. Для доказательства физической эквивалентности любого выбора направления оси z надо только показать, что одну и ту же волновую функцию можно аналогичным образом выразить во всех системах координат. Рассмотрим, например, произвольную волновую функцию, соответствующую $l = 1$:

$$\psi = C_1\psi_1 + C_0\psi_0 + C_{-1}\psi_{-1},$$

где индексы относятся к различным значениям m .

Задача 7. Доказать, что для нормировки ψ должно выполняться равенство

$$|C_1|^2 + |C_0|^2 + |C_{-1}|^2 = 1.$$

Для вращающейся системы получаем

$$\begin{aligned} \psi = & \left[\frac{C_1(1 + \cos \beta)}{2} - \frac{C_0 \sin \beta}{\sqrt{2}} + \frac{C_{-1}(\cos \beta - 1)}{2} \right] \psi'_{+1} + \\ & + \left[\frac{C_1 \sin \beta}{\sqrt{2}} + C_0 \cos \beta + \frac{C_{-1} \sin \beta}{\sqrt{2}} \right] \psi'_0 + \\ & + \left[\frac{C_1(1 - \cos \beta)}{2} + \frac{C_0 \sin \beta}{\sqrt{2}} + \frac{C_{-1}(1 + \sin \beta)}{2} \right] \psi'_{-1} = \\ & = C'_1 \psi'_{+1} + C'_0 \psi'_0 + C'_{-1} \psi'_{-1}, \quad (14.76) \end{aligned}$$

где величины со штрихом относятся к осям, которые повернуты на угол β вокруг старой оси y .

Задача 8. Доказать, что

$$|C'_1|^2 + |C'_0|^2 + |C'_{-1}|^2 = |C_1|^2 + |C_0|^2 + |C_{-1}|^2 = 1.$$

Таким образом, мы видим, что одну и ту же функцию ψ можно разложить в ряд по собственным функциям L_z , причем направление z берется произвольно. Для каждой системы координат только требуются различные коэффициенты разложения, но процедура разложения та же самая. Так как состояние системы зависит только от волновой функции, то очевидно, что квантование L в определенном направлении фактически не придает этому направлению каких-либо особых свойств и что можно получить те же самые результаты для всех физических величин при квантовании в любом другом направлении *).

В качестве примера рассмотрим опыт Штерна и Герлаха, который до сих пор описывался как квантование момента количества движения вдоль направления магнитного поля. Хотя такой выбор направления безусловно наиболее удобен, легко показать, что те же самые результаты можно получить в любой другой системе.

Для этого рассмотрим оператор $\mu \mathcal{H}$, фигурирующий в уравнении (14.68), и выберем ось z в направлении, не обязательно совпадающем с направлением поля $\mathcal{H}$. Для простоты примем $\mathcal{H}_y = 0$ **), но обобщение на произвольное $\mathcal{H}_y$ можно сделать очень просто. Итак, имеем

$$\mu \mathcal{H} \cong \mathcal{H}_x L_x + \mathcal{H}_z L_z = \frac{\hbar}{i} \left[\mathcal{H}_z \frac{\partial}{\partial \varphi} - \mathcal{H}_x \left(\operatorname{ctg} \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \right].$$

*) Это — частный случай канонического преобразования (см. гл. 16, п. 15).

**) Исходя из системы координат, использованной в п. 16, мы совершаем поворот вокруг оси y .

Теперь частица может испытать определенное отклонение только в том случае, если ее волновая функция является собственной функцией оператора $\mu\mathfrak{H}$. Однако легко показать, что собственные функции оператора $\mu\mathfrak{H}$ в точности совпадают с собственными функциями оператора $L_{z'}$ с осью z' , взятой вдоль направления магнитного поля.

Задача 9. Доказать это положение.

Это означает, что, хотя использовалась произвольная система координат, мы пришли к выводу, что только частицы с определенной составляющей вектора $\mathbf{L}$ в направлении $\mathfrak{H}$ получают определенное отклонение. Волновую функцию всегда можно разложить в ряд по трем рассматриваемым собственным функциям (при $l=1$), и коэффициенты в этом разложении дают вероятность данного отклонения в этом направлении. Итак, физические результаты не зависят от системы координат, в которой решается задача.

Физически этот вывод следует понимать с помощью представления о свойствах материи как не полностью определенных потенциальных возможностях, которые реализуются только при взаимодействиях с другими системами (см. гл. 6, п. 13 и гл. 8, п. 15). Так, когда атом имеет определенное значение L_z , он имеет неопределенные значения L_x и L_y . Однако имеется также скрытая возможность проявления определенных, но не полностью предсказываемых значений либо для L_x , либо для L_y при условии, например, что атом взаимодействует с соответствующим образом ориентированной аппаратурой Штерна и Герлаха. При этом он, конечно, будет обладать неопределенным значением L_z . Это положение о некоммутирующих переменных как взаимно несовместимых потенциальных свойствах материи качественно объясняет инвариантность физического смысла квантовомеханического понятия момента количества движения при изменении направления, в котором выбирают ось. Положение об инвариантности к повороту содержится в утверждении, что любая ось служит направлением, в котором возможно проявление определенной составляющей момента количества движения, если электрон взаимодействует с соответствующей системой.

20. Обобщение на произвольные повороты и произвольное l . Эти выводы легко обобщить на произвольные повороты, т. е. такие, которые не обязательно производятся вокруг оси y . Кроме того, аналогичные результаты можно получить для больших значений l . Действительно, можно показать, что при вращении любая данная сферическая гармоника $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ переходит в линейную комбинацию сферических гармоник с тем же самым l , причем коэффициенты разложения зависят от угла и направления вращения ([6], стр. 166). Таким образом, получаем

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \sum_{m'} C_{m, m'}^l Y_l^{m'}(\vartheta', \varphi'). \quad (14.77)$$

21. Применение к построению орбит. Некоторые из результатов этой задачи можно применить для определения волновых функций, представляющих орбиты при больших l . При $l = m$ (как было показано в п. 15) орбита лежит приблизительно в экваториальной плоскости, по крайней мере настолько, насколько соотношение неопределенности позволяет определить ее. Поставим теперь вопрос: какая волновая функция определяет орбиту, отклоняющуюся от экваториальной плоскости? Как уже известно, функции $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ не могут определять такой орбиты, поскольку они представляют состояние, в котором совершенно неизвестны соответствующие величины L_x и L_y . Отклоненную орбиту можно легко построить, если взять орбиту в экваториальной плоскости, а затем повернуть оси координат на некоторый угол γ . Тогда в соответствии с уравнением (14.75) волновая функция после поворота равна

$$\psi_l^l(\vartheta, \varphi) = \sum_m C_{l,m}^l Y_l^m(\vartheta', \varphi').$$

Таким образом, отклоненная орбита определяется линейной комбинацией сферических гармоник, точное значение которой зависит от $C_{l,m}^l$. Мы не будем здесь подробно рассматривать значения C , а просто укажем, что когда C рассчитаны для случая больших l , то получается волновой пакет сферических гармоник, имеющий острый максимум для того значения m , которое соответствует проекции L на ось z . Но для определения направления плоскости орбиты числу m надо придать некоторую неопределенность в том смысле, что мы определяем интервал величин m . Однако в классическом пределе этим интервалом величин можно пренебречь, поэтому кажется, что система имеет определенное значение каждой составляющей момента и, следовательно, определенное направление плоскости, в которой лежит орбита.

Задача 10. Используя свойства ортогональности и нормировки $P_l(\cos \vartheta)$, получить разложение функции $\delta(\vartheta - \vartheta_0)$ по полиномам Лежандра. Получить соответствующее разложение $\delta(\vartheta - \vartheta_0) \delta(\varphi - \varphi_0)$ по сферическим гармоникам.

Мы можем резюмировать изложенное, сказав, что электрон с определенным моментом количества движения в квантовой теории сильно отличается от электрона в классическом представлении. В квантовой теории он может иметь определенный момент только в том случае, если его волновая функция соответствующим образом зависит от угла, т. е. от $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$. Это аналогично тому, что электрон может иметь определенный импульс только в том случае, если его волновая функция соответствующим образом зависит от координаты, т. е. представляется в виде $e^{ipx/\hbar}$. Поэтому бессмысленно рассматривать электрон как объект, у которого одновременно определены угол и

момент. Последнее снова иллюстрирует волновую структуру материи, которую нельзя понять на основе представления о материи как совокупности классических частиц.

Когда угол измерен, действие аппаратуры превращает систему из объекта, подобного волне (с определенным моментом количества движения и неопределенным углом), в объект, подобный частице (с определенным углом и неопределенным моментом количества движения). С другой стороны, если вслед за этим измерен момент количества движения, система вновь превращается в объект, подобный волне (см. гл. 6, пп. 4—10).

РЕШЕНИЕ РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ; АТОМ ВОДОРОДА; ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

В этой главе будет продолжено решение волнового уравнения в трех измерениях, результаты этого решения будут применены к многочисленным задачам.

1. Радиальное уравнение. Поскольку произвольную функцию от ϑ и φ можно разложить в ряд по поверхностным гармоникам, то произвольную функцию от r , ϑ и φ также можно разложить по ним, если коэффициенты у поверхностных гармоник будут функциями от r . Таким образом,

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l, m} f_{l, m}(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi). \quad (15.1)$$

Это разложение по $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ можно провести при любой фиксированной величине r . Тогда получившиеся коэффициенты разложения будут зависеть от r . Для выявления этой зависимости рассмотрим функции $f_{l, m}(r)$ как коэффициенты.

В соответствии с уравнениями (14.17) и (14.35) уравнение Шрёдингера можно теперь записать в виде

$$\sum_{l, m} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - E + V(r) + \right. \\ \left. + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f_{l, m}(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi) = 0. \quad (15.2a)$$

Последнее уравнение справедливо для произвольных значений ϑ и φ , если

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f_{l, m} + [-E + V(r)] f_{l, m} = 0. \quad (15.26)$$

(Это можно доказать, умножая (15.2a) на $Y_r^s(\vartheta, \varphi)$ и интегрируя по ϑ и φ .)

Задача 1. Доказать вышеприведенное уравнение.

Отметим, что уравнение для $f_{l, m}(r)$ зависит только от l и не зависит от m . Здесь и далее мы будем писать $f_{l, m}(r) = f_l(r)$.

Уравнение (15.26) можно упростить, сделав подстановку $f_l(r) = g_l(r)/r$, тогда

$$\frac{d^2 g_l(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) \right] g_l(r) = 0. \quad (15.3)$$

2. Нормировка g_l . Элемент объема в сферических полярных координатах равен $r^2 dr d\Omega$. Но $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ уже нормированы по $d\Omega$. Поэтому $f_l(r)$ нужно нормировать только по радиусу

$$\int_0^\infty |f_l(r)|^2 r^2 dr = 1. \quad (15.4a)$$

Так как $rf_l = g_l$,

$$\int_0^\infty |g_l(r)|^2 dr = 1. \quad (15.46)$$

3. Частный случай: $l=0$ (s-волны). В частном случае, когда $l=0$, вышеприведенное уравнение для $g(r)$ совпадает с уравнением Шрёдингера для ψ в одном измерении. Но здесь имеется важное качественное отличие. Поскольку ψ везде должна быть конечной и поскольку $g=rf$, ясно, что g должно стремиться к нулю в начале координат по крайней мере так же, как и r . Это новое граничное условие отсутствовало в одномерной задаче, однако оно уже использовалось в задаче дейтрона (см. гл. 11, п. 14).

Состояния с моментом количества движения, равным нулю, называются s-состояниями. Эта терминология сохранилась с времен возникновения спектроскопии (см. [40], стр. 13). По этой терминологии состояния с различными моментами количества движения обозначаются следующим образом:

l Обозначение

0	s	резкая (sharp)
1	p	главная (principal)
2	d	диффузная (diffuse)
3	f	фундаментальная (fundamental)
4	g	

Далее буквы идут в алфавитном порядке.

4. Центробежный потенциал. При $l \neq 0$ уравнение для g_l совпадает с уравнением Шрёдингера для ψ одного измерения, причем потенциальная функция равна $V(r) + \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1)$. Таким образом, система действует так, как если бы имелся потенциал поля отталкивания $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$ в дополнение к обычному потенциалу.

Как указано в гл. 2, п. 14, этот потенциал поля отталкивания можно считать обусловленным центробежной силой, которая стремится удерживать частицы с ненулевым моментом количества движения далеко от начала координат. Предположим, например, что потенциал $V(r)$ равен $-e^2/r$ (кулоновский потенциал). Тогда эффективный потенциал при $l \neq 0$ должен иметь вид, схематически изображенный на рис. 69. На больших расстояниях от начала координат преобладает кулоновский потенциал, но при малых r он с избытком перекрывается членом отталкивающей центробежной силы.

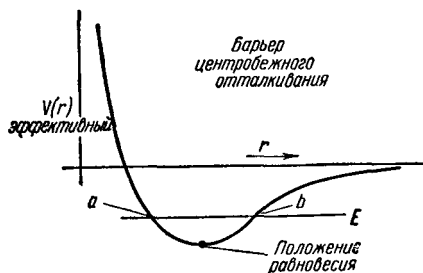


Рис. 69.

Равновесие наступает тогда, когда производная эффективного потенциала равна нулю:

$$\frac{\partial V}{\partial r} - l(l+1) \frac{\hbar^2}{mr^3} = 0. \quad (15.5a)$$

Для кулоновской силы притяжения $\partial V/\partial r = e^2/r^2$, и мы получаем

$$r_{\text{равнов}} = \frac{l(l+1) \hbar^2}{me^2}. \quad (15.5b)$$

Равновесный радиус, как и следовало ожидать, возрастает с ростом момента количества движения. Этот радиус является расстоянием, на котором сила притяжения уравнивается центробежной силой. Поэтому он совпадает с классическим радиусом для круговой орбиты.

В общем случае частица, находящаяся в связанном состоянии ($E < 0$), колеблется (классически) между некоторыми пределами при $r=a$ и $r=b$, как показано на рис. 69. Например, для эллиптической орбиты атома водорода радиус периодически колеблется между внутренним и внешним пределами. Только для круговых орбит колебания отсутствуют.

5. Разделение переменных в относительных координатах. До сих пор мы считали, что потенциал является функцией расстояния r от фиксированной точки. Во многих задачах, таких, например, как задача об атоме водорода, потенциал является функцией относительного расстояния $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ между электроном и протоном ($\mathbf{r}_1$ — радиус-вектор электрона и $\mathbf{r}_2$ — протона). Тем не менее, как и в классической теории, общее уравнение можно разделить на два, одно из которых будет зависеть только от $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, а другое — только от координат центра масс. Чтобы показать это, запишем гамильтониан для двух частиц следующим образом (см. гл. 10, п. 11):

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = H. \quad (15.6)$$

Произведем теперь подстановку

$$\xi = r_1 - r_2, \quad \eta = \frac{(m_1 r_1 + m_2 r_2)}{(m_1 + m_2)},$$

где ξ — расстояние между двумя частицами, а η — координата их центра масс.

Читателю предлагается в качестве упражнения доказать, что

$$H = \frac{-\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \nabla_\eta^2 - \frac{\hbar^2(m_1 + m_2)}{2m_1 m_2} \nabla_\xi^2 + V(\xi). \quad (15.7)$$

Задача 2. Доказать вышеприведенное положение.

Волновую функцию будем искать в виде произведения $\psi = F(\xi) G(\eta)$. Позже будет показано, что произвольную волновую функцию действительно можно выбирать в виде суммы таких произведений. Тогда собственные значения оператора H определяются уравнением

$$\frac{-\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} F(\xi) \nabla_\eta^2 G(\eta) - \frac{\hbar^2(m_1 + m_2)}{2m_1 m_2} G(\eta) \nabla_\xi^2 F(\xi) + \\ + V(\xi) F(\xi) G(\eta) = E F(\xi) G(\eta). \quad (15.8)$$

Деля это уравнение на $F(\xi) G(\eta)$, находим

$$\frac{-\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \frac{\nabla_\eta^2 G(\eta)}{G(\eta)} + \left[-\frac{\hbar^2(m_1 + m_2)}{2m_1 m_2} \frac{\nabla_\xi^2 F(\xi)}{F(\xi)} + V(\xi) \right] = E. \quad (15.9)$$

Уравнение (15.9) можно решить для произвольных ξ и η только при условии, что части, зависящие от η и ξ , по отдельности тождественно равны одной и той же постоянной. Таким образом, мы получаем

$$\frac{-\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \frac{\nabla_\eta^2 G(\eta)}{G(\eta)} = E_0 = \text{const.} \quad (15.10)$$

Уравнение (15.10) точно совпадает с уравнением Шрёдингера для свободной частицы с массой $m_1 + m_2$. Поэтому волновая функция для центра масс ведет себя точно так же, как если бы система представляла одну частицу с кинетической энергией E_0 и с массой, равной общей массе системы. Это квантовый аналог известного классического результата, согласно которому центр масс системы частиц движется с постоянной скоростью независимо от сил, действующих между частицами. Квантовый результат можно также обобщить на произвольное число частиц. Функция $G(\eta)$ при этом имеет вид

$$G(\eta) = A e^{i p \frac{\eta}{\hbar}} + B e^{-i p \frac{\eta}{\hbar}}, \quad (15.11)$$

где A и B — произвольные постоянные, а $|p| = \sqrt{2(m_1 + m_2)E_0}$.

Обозначим разность между полной энергией E и энергией E_0 , связанной с центром масс, через E_r (относительная энергия). Тогда уравнение для функции F примет вид

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 F + (E_r - V) F = 0, \quad (15.12)$$

где

$$E_r = E - E_0 \quad \text{и} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2};$$

μ называется *приведенной массой*. Ясно, что это уравнение аналогично уравнению для частицы с энергией E_r и с приведенной массой μ в поле потенциала с источником в фиксированном центре.

Обычно при решении задач, подобных задаче об атоме водорода, нас интересует не энергия движения атома в целом, а только энергия относительного движения электрона и протона. Эта относительная энергия проявляется, например, в форме излучения, когда электрон переходит из одного данного стационарного состояния в другое, с более низкой энергией. Поэтому практически мы обычно решаем только уравнение для $F(\xi)$ и получаем возможные значения E_r , которые ниже обозначаются через E . Эта процедура уже излагалась при решении задачи об определении уровней энергии дейтрона (гл. 11, п. 14), где две частицы (нейтрон и протон) имеют практически одинаковую массу, так что $\mu = m/2$.

Возможность использования функциональных рядов типа $F(\xi)G(\eta)$ для представления произвольной функции от ξ и η обусловлена тем, что и F , и G являются собственными функциями эрмитовского оператора (G — собственная функция оператора $-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta_\eta^2$, а F — собственная функция оператора, входящего в уравнение (15.12)). Поэтому в соответствии с теоремой разложения произвольную функцию можно разложить в ряд по этим произведениям. Здесь и далее, если нет специальной оговорки, мы ограничимся решением для $F(\xi)$, помня при этом, что полная волновая функция является суммой произведений $F(\xi)G(\eta)$.

6. Предварительное обсуждение общей формы решения для атома водорода. Продолжим решение уравнения Шрёдингера для атома водорода. Однако сначала качественно обсудим общую форму решений, чтобы показать технику нахождения вида волновой функции без точного решения задачи. Ограничимся рассмотрением функции, зависящей от относительных координат $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, обозначив их здесь и далее через $\mathbf{r}$. Мы также ограничимся нахождением только тех решений, для которых E отрицательна, что соответствует связанным состояниям. Решение с положительными E соответствует электронам, которые приходят из бесконечности, претерпевают рассеяние на потенциале и затем снова уходят в бесконечность. Этот тип решения

будет исследован в гл. 21 в связи с задачами рассеяния. В классической физике положительным E соответствуют гиперболические орбиты, а отрицательным E — эллиптические.

7. Общая форма решения для s -волн. Для s -волн центробежный потенциал отсутствует и действующий потенциал имеет вид, показанный на рис. 70. Если энергия отрицательна, то имеется точка $r = a$, за которой разность $E - V$ отрицательна. Классически это означает, что частица никогда не достигает точек с радиусом, большим чем a . Величина этого радиуса находится из равенства $|E| = e^2/a$ или $a = e^2/|E|$. За этой точкой решения не колеблются, а имеют в общем случае экспоненциальный характер. При $r \rightarrow \infty$ можно пренебречь потенциалом и приближенно оценить асимптотическое поведение функции g из уравнения (15.3), решая более простое уравнение

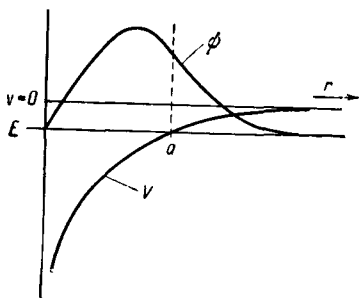


Рис. 70.

$$\frac{d^2g}{dr^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} |E| g = 0,$$

$$g = A \exp\left(-\sqrt{\frac{2\mu |E|}{\hbar^2}} r\right) + B \exp\left(\sqrt{\frac{2\mu |E|}{\hbar^2}} r\right). \quad (15.13)$$

Для того чтобы волновая функция оставалась конечной при $r \rightarrow \infty$, должен равняться нулю коэффициент B при возрастающей экспоненте. Мы увидим, что это требование определяет допустимые значения энергии $|E|$.

В начале координат функция g должна равняться нулю. Общую форму решения можно найти с помощью рассуждений, приведенных в гл. 11, п. 12. При $r < a$ разность $E - V$ положительна, следовательно, если функция g положительна, то волновая функция должна иметь отрицательную кривизну. Если разность $E - V$ достаточно велика, то решение может обладать столь большой кривизной, что при $r = a$ становится отрицательным наклон функции g . За точкой $r = a$ кривизна положительна. В общем случае функция g будет стремиться к виду возрастающей экспоненты при $r \rightarrow \infty$, но для определенной величины $|E|$ она будет точно соответствовать спадающей экспоненте. Эта величина $|E|$ и будет собственным значением энергии. Волновая функция, полученная таким образом, показана на рис. 70. Она не имеет узлов, кроме неизбежного в начале координат. Поэтому она должна соответствовать наименьшему энергетическому состоянию, поскольку колеблющаяся волновая функция имеет большую кинетическую энергию, чем неколеблющаяся.

В следующем состоянии с большей энергией волновая функция переходит в затухающую экспоненту после того, как она прошла через узел. Поскольку E больше ($|E|$ меньше, но E отрицательна), длина волны в потенциальном поле, равная

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m(E-V)}},$$

меньше*), так что эта волновая функция колеблется быстрее, чем решение для меньшей энергии. Для энергетически более высоких состояний имеется больше пространства для колебаний, потому что точка возврата соответствует большим значениям радиуса, когда $|E|$ меньше ($a = e^2/|E|$). Волновая функция такого состояния схематически изображена на рис. 71.

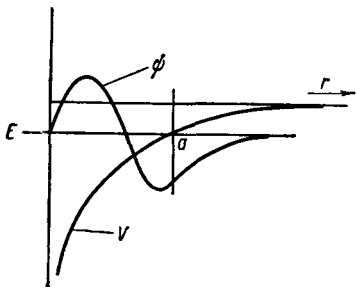


Рис. 71.

Состояния с еще большими энергиями дадут волновые функции с еще большим числом узлов. В случае прямоугольного потенциала число возможных связанных состояний зависит от глубины потенциальной ямы и от радиуса. Однако мы увидим, что кулоновский потенциал имеет бесконечно большое число связанных состояний.

Это вызвано сравнительно медленным убыванием кулоновской силы с расстоянием, настолько медленным, что фактически всегда возможно получить еще большее число колебаний волновой функции при уменьшении $|E|$ и, следовательно, при увеличении a .

Применение метода ВКБ для приближенного определения энергетических уровней. Для более подробного рассмотрения указанного выше свойства кулоновского потенциала воспользуемся приближением ВКБ, которое применимо, если волновая функция многократно колеблется и имеет некоторое значение даже для более низких квантовых состояний. Однако мы должны быть осторожны и выбирать только такие решения, которые обращаются в нуль в начале координат. Поэтому для решения в приближении ВКБ запишем

$$g \sim \frac{1}{\sqrt{E-V}} \sin \left[\int_0^r \sqrt{2m(E-V)} \frac{dr}{\hbar} \right]. \quad (15.14a)$$

*) Этот довод довольно груб, так как, когда потенциал является функцией точки, длина волны в данной точке не имеет точно определимого значения. Однако если V не меняется слишком быстро, этой длине волны можно придать приближенное значение в рамках метода ВКБ (см. гл. 12).

Для выяснения поведения функции g при $r \rightarrow \infty$ применим формулы связи для случая барьера, расположенного справа (см. формулу (12.39)). Заметим, что точка возврата соответствует $r = a$. Для определения g перепишем уравнение (15.14a) в такой форме:

$$g \sim \frac{1}{\sqrt{E-V}} \sin \left[\int_0^a \sqrt{2m(E-V)} \frac{dr}{\hbar} - \int_r^a \sqrt{2m(E-V)} \frac{dr}{\hbar} \right] = \\ = \frac{-1}{\sqrt{E-V}} \cos \left[\int_r^a \sqrt{2m(E-V)} \frac{dr}{\hbar} - \int_0^a \sqrt{2m(E-V)} \frac{dr}{\hbar} + \frac{\pi}{2} \right].$$

Формулы связи (12.39) показывают, что g совпадает со спадающей экспонентой лишь при условии (и только при нем):

$$\frac{\pi}{2} - \int_0^a \sqrt{2m(E-V)} \frac{dr}{\hbar} = -\frac{\pi}{4} - N\pi,$$

где N — целое число, или

$$J = 2 \int_0^a \sqrt{2m(E-V)} dr = \left(N + \frac{3}{4}\right) \hbar. \quad (15.146)$$

Отметим появление члена $3/4$ в квантовом условии. Это обусловлено требованием, чтобы волновая функция была равна нулю в начале координат, в отличие от случая одномерной задачи (см. уравнение (12.55)), когда такое требование отсутствовало.

Необходимо вычислить интеграл

$$J = 2 \sqrt{2m} \int_0^a \sqrt{-|E| + \frac{e^2}{r}} dr,$$

где $a = e^2/|E|$. Сделаем сначала подстановку $r = ay = e^2 y/|E|$. Это дает

$$J = \frac{2e^2}{\sqrt{|E|}} \sqrt{2m} \int_0^1 \sqrt{\frac{1}{y} - 1} dy.$$

Интеграл легко вычисляется и равен $\pi/2$. Тогда квантовое условие (15.146) принимает вид

$$\frac{\pi e^2}{2\hbar} \sqrt{\frac{2m}{|E|}} = \left(N + \frac{3}{4}\right) \pi. \quad (15.15a)$$

Решая его относительно E , получим

$$E = - \frac{me^4}{2\hbar^2 \left[N + \frac{3}{4} \right]^2}, \quad (15.156)$$

где N — любое целое число, начиная с нуля. Это решение отличается от точного решения (15.22) тем, что здесь появился член $N + 3/4$ вместо $N + 1$. Все же формула (15.156) очень близка к истинной, и в соответствующих пределах различие между нею и точной формулой столь мало, что делается практически незаметным. Эта формула непригодна при малых значениях N , что связано с грубостью самого приближения ВКБ.

Задача 3. Исследовать применимость приближения ВКБ к волновым функциям для различных величин N в случае кулоновского потенциала.

Собственные значения для предельно высоких уровней. Ясно, что при $N \rightarrow \infty$ энергетические уровни приближаются все больше и больше и в конце концов переходят в непрерывный ряд (континуум) состояний, который начинается при $|E| = 0$. Плотность уровней с ростом N все увеличивается. Поэтому для высоких квантовых состояний уровни настолько сближаются, что трудно определить различие между дискретными квантованными уровнями и непрерывным рядом энергий, предсказываемым классической теорией. Диаграмма энергетических уровней представлена на рис. 6.

Представляет интерес более подробно выяснить причину появления бесконечного числа (континуума) уровней для атома водорода, в противоположность конечному числу уровней в случае прямоугольной ямы. Как уже отмечалось, причина этого заключается в том, что потенциал атома водорода простирается до бесконечности. Возникает вопрос: что произойдет с каким-либо другим потенциалом, непрерывно убывающим при $r \rightarrow \infty$, например с $1/r^n$ или e^{-br} ? Возникнет ли в этом случае бесконечное число уровней при $|E| \rightarrow 0$ (как и в атоме водорода) или потенциал будет больше напоминать прямоугольную потенциальную яму и появится конечное число уровней? Здесь мы не будем давать подробный ответ с доказательством, а просто укажем результат: при $V \rightarrow 0$ как r^{-n} и $n \leq 2$ возникает бесконечное число энергетических уровней, но если $n > 2$, то число уровней будет конечным. Для e^{-br} их тоже будет только конечное число. Доказательство этих положений предлагаем провести читателю в качестве упражнения.

Определение главного квантового числа. Всякий раз, когда функция g имеет узел, мы получаем новый энергетический уровень. Поэтому число узлов дает удобную классификацию различных состояний. Число узлов g (включая один в начале координат) называется главным квантовым числом состояния и обычно обозначается

символом n . Это определение применимо только к s -состояниям, ниже оно будет обобщено для состояний с большими моментами количества движения.

Ясно, что каждый узел (за исключением узла при $r=0$) определяет поверхность, на которой исчезает волновая функция. В данном случае поверхность является сферической. В более общих задачах удобно определять главное квантовое число как полное число узловых поверхностей, которые в общем случае не обязательно сферические. К этому вопросу мы вернемся после обсуждения решений с большими моментами количества движения.

8. Общий вид решения при $l > 0$. Когда $l \neq 0$, появляется еще отталкивающий центробежный потенциал, вызывающий эффективный потенциал (рис. 72). В классическом случае частица колебалась бы между точками a и b , для которых радиальная составляющая скорости исчезает. Легко найти общий вид решения. Известно, что $g=0$ при $r=0$. Можно показать, что вблизи начала координат хорошим приближением будет $g \cong r^{(l+1)}$. Заметим, что при малых r главный член эффективного потенциала равен $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$. Таким образом, дифференциальное уравнение задачи в этой области может быть аппроксимировано так:

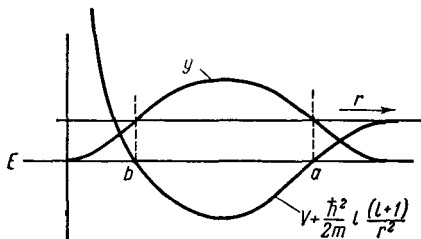


Рис. 72.

$$\frac{d^2 g}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} g \cong 0. \tag{15.16a}$$

Легко показать прямой подстановкой, что наиболее общим решением будет

$$g = Ar^{l+1} + Br^{-l}, \tag{15.16б}$$

где A и B — произвольные постоянные. Решение, содержащее r^{-l} , недопустимо, поскольку $g=0$ в начале координат. Итак, вблизи начала координат приближенное решение имеет вид

$$g \cong Ar^{l+1}. \tag{15.16в}$$

Представив графически эту функцию, мы видим, что для $l > 0$ вогнутость ее направлена вверх при увеличении r . Такой знак кривизны понятен, если вспомнить, что эффективная кинетическая энергия отрицательна. Тогда если функция g положительна, то наклон волновой функции должен возрасть с увеличением r . Это возрастание наклона продолжается от начала координат до точки $r=b$, где эффективная кинетическая энергия становится положительной

и где соответственно кривизна волновой функции меняет знак (вогнутость ее направлена вниз). Первое связанное состояние будет при энергии, для которой кривая g имеет направленную вниз вогнутость, смыкающуюся с экспоненциально убывающим участком при $r > a$. Второе связанное состояние осуществляется, когда функция g переходит в экспоненциальный спад после прохождения через узел; третье — после прохождения двух узлов и т. д.

Задача 4. Найти энергетические уровни при $l > 0$, пользуясь приближением ВКБ. Заметим, что при $l \neq 0$ нет необходимости вводить граничное условие, что $g = 0$ в начале координат, поскольку эффективный центробежный барьер автоматически включает это условие. Здесь можно применить обычную трактовку приближения ВКБ (гл. 12, п. 13) для определения энергетических уровней.

Малая величина волновой функции вблизи начала координат при $l > 0$ является, конечно, результатом эффекта отталкивания центробежного потенциала. Ясно, что весьма мала вероятность найти частицу с большим значением момента количества движения вблизи начала координат. В самом деле, маловероятно найти частицу до тех пор, пока не достигнут достаточно большой радиус, чтобы эффективную радиальную кинетическую энергию сделать положительной. Это становится возможным, когда

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \cong \frac{p^2}{2m},$$

где p — полный импульс. Поэтому маловероятно найти частицу на расстояниях меньше тех, которые определяются из соотношения $pr = \hbar \sqrt{l(l+1)}$. Грубо говоря, этот результат указывает на то, что маловероятно найти частицу с импульсом p ближе к началу координат, чем на расстоянии, на котором классическая частица, движущаяся с этим импульсом по круговой орбите, будет иметь соответствующий момент количества движения.

9. Определение квантовых чисел. В задачах атомной физики принято обозначать квантовые состояния следующими тремя квантовыми числами:

n — главное квантовое число;

l — орбитальное квантовое число;

m — магнитное квантовое число или z -составляющая момента количества движения в единицах $\hbar$.

Главное квантовое число определяется как общее число узловых поверхностей волновой функции плюс единица. Если пользоваться умноженной на r волновой функцией, которая в нашем случае равна $g_l Y_l^m(\theta, \varphi)$, то главное квантовое число будет равно полному числу узловых поверхностей этой функции, если рассматривать узел в начале координат как поверхность. Поскольку существует l узловых поверхностей (см. гл. 14, п. 15) в сферической гармонике

степени l , то главное квантовое число равно тогда $l + N$, где N — число узлов радиальной функции g (включая узел в начале координат).

Такое определение n станет ясным после того, как будут найдены точные значения энергетических уровней атома водорода.

Если учесть еще и спин электрона, то квантовые числа должны быть видоизменены, как это будет показано в гл. 17.

10. Физическая интерпретация волновых функций при различных n, l, m .

Случай 1: $l = 0$. Это состояние с нулевым моментом количества движения. Классическая орбита с нулевым моментом количества движения такова, что частица на ней движется в радиальном направлении, колеблясь взад и вперед, периодически то попадая в центр атома, то удаляясь от него. В квантовой механике нельзя говорить о точной орбите, но это понятие можно заменить волновым пакетом. Чтобы создать пакет, который движется по определенной радиальной линии (т. е. с определенными углами φ и η), нужно включить в него много различных моментов количества движения (см. гл. 14, п. 21). Поэтому нельзя больше говорить, что для состояния с нулевым моментом количества движения частица проходит точно через центр атома, поскольку точное определение ее пути требует знания многих моментов количества движения. Все же можно сказать, что в s -состоянии частица в среднем ближе подходит к ядру, чем в любом другом состоянии. Последнее объясняется отсутствием центробежного барьера. Этот факт отражается формой волновой функции вблизи начала координат $g \sim r^{l+1}$ (чем больше l , тем меньше g вблизи начала координат).

Случай 2: $l > 0$. Это состояния с ненулевым моментом количества движения, в классическом пределе они соответствуют круговым или эллиптическим орбитам. Для круговой классической орбиты радиус r точно определен и не меняется с течением времени. Конечно, в квантовой теории это невозможно из-за соотношений неопределенностей. Все же наиболее близкой к круговой будет такая орбита, для которой радиальная часть волновой функции была бы наиболее локализованной и имела бы наименьшее число узлов. Если в данной области волновая функция много раз меняет знак, что происходит при наличии многих узлов, то соответственно получается большой импульс для направления, в котором происходят эти изменения знака. Дело в том, что средняя величина p равна $\frac{\hbar}{i} \int \psi^* \text{grad } \psi dx$, и если ψ быстро меняет знак, это приводит к большим значениям $\text{grad } \psi$, т. е. соответственно к большим импульсам*). Если радиальная часть волновой

*) Фактически оператор радиального импульса равен не $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}$, а $\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$ (см. [4], стр. 153). Однако дополнительный член не оказывает существенного влияния.

функции имеет несколько узлов, то она соответствует орбите, форма которой дальше от окружности, чем для волновой функции, имеющей только один узел, просто потому, что для круговой орбиты нужен нулевой радиальный импульс.

Поскольку состояния с $l = n - 1$ имеют минимум числа радиальных колебаний волновой функции, то они соответствуют орбитам, более близким к окружностям. Чтобы подробнее выяснить это, рассмотрим полную волновую функцию

$$\psi = \frac{g_l(r)}{r} Y_l^m(\vartheta, \varphi).$$

Мы уже видели, что различные значения m описывают различные ориентации плоскости приближенной орбиты (гл. 14, пп. 12, 15 и 21). Чтобы получить плоскость орбиты, приблизительно нормальную к оси z , примем $l = m$ (см. гл. 14, п. 15). Тогда если принять $n - 1 = l$ (т. е. один узел в радиальной части волновой функции), то волновая функция будет велика только внутри тороидальной области с центром в плоскости xu и с радиусом, для которого эффективный потенциал, показанный на рис. 72, является минимальным. Итак, мы подтвердили вид волновой функции, принятый в гл. 3, п. 15.

11. Образование волновых пакетов. Для состояния с $n - 1 > l$ радиальная часть волновой функции имеет узлы не только в начале координат. Как мы видели, это соответствует дополнительному радиальному импульсу. В классическом пределе эти волновые функции соответствуют эллиптическим орбитам. С первого взгляда может показаться, что, поскольку ψ есть произведение радиальной и угловой волновых функций, корреляция между переменными r и φ может и отсутствовать (φ необходима для описания эллиптической орбиты). Для получения этой корреляции надо построить волновой пакет, используя ряд значений l . Мы не будем проделывать этого здесь, а только упомянем, что таким путем образуются эллиптические тороидальные волновые пакеты, когда l и n большие. Такие l и n нужны потому, что при образовании пакета требуются быстро колеблющиеся функции, иначе не удалось бы получить с помощью интерференции спад интенсивности на больших расстояниях от центра пакета.

12. Точное решение для атома водорода. Решим теперь точно задачу для атома водорода. При этом удобно использовать следующие подстановки в уравнении (15.3):

$$r = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} x, \quad \sqrt{2\mu} \frac{e^2}{\hbar} = k, \quad E = -W, \quad (15.17a)$$

где W — энергия связи. Тогда уравнение (15.3) примет вид

$$\frac{d^2 g}{dx^2} + \left[\frac{k}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} - W \right] g = 0. \quad (15.176)$$

Мы уже видели, что для больших x решение приближенно равно $g = e^{-V\bar{W}x}$ (см. уравнение (15.13)). Это указывает на то, что решение удобно записать в виде

$$g = Ue^{-V\bar{W}x}.$$

Подстановка этого значения g в уравнение (15.176) дает

$$\frac{d^2U}{dx^2} - 2V\bar{W}\frac{dU}{dx} + \left[\frac{k}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] U = 0. \quad (15.18)$$

Наше граничное условие для U заключается в следующем: при $x \rightarrow \infty$ $Ue^{-V\bar{W}x}$ должно достаточно быстро стремиться к нулю, так, чтобы интегральная вероятность была конечной, или, другими словами, чтобы интеграл $\int_0^\infty U^2 e^{-2V\bar{W}x} dx$ сходиллся.

Эту задачу можно решить многими способами. Например, метод факторизации дифференциального уравнения, применявшийся при решении задачи гармонического осциллятора (см. гл. 13), может быть применен также и здесь. Однако мы воспользуемся другим способом, чтобы проиллюстрировать более общий, но менее изящный метод, а именно разложение в степенной ряд.

Поэтому будем искать решение в виде

$$U = \sum_{N=0}^{\infty} C_N x^{N+s}.$$

Мы выбрали x^{N+s} потому, что, как явствует уже из уравнения (15.16в), решение в общем случае начинается с x в некоторой степени; значение s будет определено из волнового уравнения.

Подстановка вышеприведенного выражения в уравнение (15.18) дает

$$\sum_N C_N [(N+s)(N+s-1)x^{N+s-2} - 2(N+s)V\bar{W}x^{N+s-1} - l(l+1)x^{N+s-2} + kx^{N+s-1}] = 0. \quad (15.19a)$$

Собирая все члены с равными степенями x , получим

$$\sum_N x^{N+s-2} \{ C_N [(N+s)(N+s-1) - l(l+1)] - C_{N-1} [2V\bar{W}(N+s-1) - k] \} = 0. \quad (15.19b)$$

Для того чтобы это уравнение было справедливо при произвольных значениях x , коэффициент перед каждой степенью x должен быть

равен нулю. Это приводит к следующему выражению:

$$\frac{C_N}{C_{N-1}} = \frac{2(N+s-1)\sqrt{W}-k}{(N+s)(N+s-1)-l(l+1)}. \quad (15.19в)$$

Так как по предположению $C_{-1}=0$ и $C_0 \neq 0$, то

$$s(s-1)=l(l+1).$$

Это уравнение надо рассматривать как определение наиминишей степени x , присутствующей в разложении. Решения его имеют вид

$$s=l+1, \quad s=-l.$$

Этот результат находится в согласии с выражением (15.166), которое получено при решении уравнения с помощью приближения, пригодного лишь для малых x . Поскольку в начале координат $g=0$, то решение с $s=-l$ приводит к физически неприемлемой волновой функции. Поэтому единственное подходящее решение имеет вид $s=l+1$.

При любом выборе коэффициента C_0 можно определить C_1 , подставив в уравнение (15.19в) $N=1$. C_2 можно получить из C_1 подстановкой $N=2$ и т. д. Следовательно, можно получить полное решение при условии, что ряд сходится.

Нетрудно доказать, что ряд сходится для всех значений x . Заметим для этого, что отношение последующих членов ряда равно

$$\frac{C_N x}{C_{N-1}} = \frac{[2(N+s-1)\sqrt{W}-k]x}{(N+s)(N+s-1)-l(l+1)}. \quad (15.19г)$$

Для больших N это отношение асимптотически приближается к $2\sqrt{W}x/N$. Это то же самое отношение, что и для членов ряда

$$e^{2\sqrt{W}x} = \sum_N \frac{(2\sqrt{W}x)^N}{N!}. \quad \text{В математическом анализе доказывается}$$

(см. [33], гл. 2), что два ряда, для которых предел отношения членов один и тот же и не равен единице, сходятся и расходятся вместе. Так как экспоненциальные ряды сходятся для всех значений x , то сходятся и ряды, выведенные нами для U .

Следующий вопрос заключается в том, как ведет себя решение при $x \rightarrow \infty$. Для ответа на этот вопрос используем обобщение вышеприведенной теоремы, устанавливающей, что при $x \rightarrow \infty$ два ряда, для которых отношение (15.19г) одно и то же и не равно единице, одинаково стремятся к бесконечности. Другими словами, при $x \rightarrow \infty$ наша волновая функция ведет себя, как $e^{2\sqrt{W}x}$. Итак, имеем

$$g = Ue^{-V\sqrt{W}x} \sim e^{V\sqrt{W}x} \quad \text{при} \quad x \rightarrow \infty.$$

В связи с этим вышеприведенные ряды в общем случае приводят к неподходящей волновой функции. Однако существует исключение в том случае, если ряд обрывается и содержит конечное число членов N , потому что тогда g равно $e^{-V\overline{W}} x P(x)$, где $P(x)$ — полином конечной степени от x . Ясно, что это квадратично интегрируемая функция. Условие обрыва заключается в том, что коэффициент C_N исчезает для некоторого конечного значения N , которое должно быть равно по крайней мере единице, если решение само по себе не равно нулю. В соответствии с выражением (15.19в) (принимая $s = l + 1$) это осуществляется при

$$2(N + l)V\overline{W} = k \quad \text{или} \quad W = \frac{k^2}{4(N + l)^2}. \quad (15.19д)$$

Из определения k (см. уравнения (15.17а)) получаем

$$E = -W = \frac{-\mu e^4}{2\hbar^2(N + l)^2}. \quad (15.20)$$

Это энергетические уровни атома водорода. Отметим, что сюда должна входить приведенная масса μ .

Так как ряд обрывается на N -м члене, то ясно, что $U(x)$ равно x^{l+1} , умноженному на полином в степени $N - 1$. Следовательно, он может иметь самое большее N вещественных нулей. Можно показать, что он должен всегда иметь N вещественных нулей, но доказательство здесь не приводится. Из этого мы заключаем, что волновая функция имеет N узлов (включая узел в начале координат, обусловленный множителем x^{l+1}). При сравнении этой волновой функции с общей формой, описанной в пп. 7 и 8, становится ясным, что это одна и та же функция. Итак, имеем

$$g = x^{l+1} p_N^l(x) e^{-V\overline{W} x}, \quad (15.21)$$

где $p_N^l(x)$ — полином степени N *). Волновая функция вначале ведет себя, как x^{l+1} , проходит через $N - 1$ узлов, за исключением узла в начале координат, и наконец затухает экспоненциально.

Из нашего определения главного квантового числа следует (см. п. 9) $n = N + l$. Поэтому энергетические уровни атома водорода даются выражением

$$E = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}. \quad (15.22)$$

Это те же уровни, которые получил Бор в своей ранней квантовой теории (уравнение (2.19)).

*) См. п. 14 для точного определения $p_N^l(x)$.

13. Вырождение энергетических уровней атома водорода.

Мы видели, что энергетические уровни атома водорода зависят только от главного квантового числа n , но не от l или m . Следовательно, чтобы узнать энергию, достаточно знать только значение n , а если n определено, то энергия уже не зависит от величины l или m . Поэтому в общем случае может быть много различных квантовых состояний с одной и той же энергией, т. е. система может быть вырождена (см. гл. 10, п. 14). Наинизшему состоянию соответствует $n=1$, в этом случае радиальная волновая функция имеет только один узел в начале координат. Так как $n=N+l$, где N — число узлов радиальной волновой функции, то для этого состояния $l=0$. Следовательно, это состояние невырожденное, так как имеется только одна волновая функция с $n=1$, а именно та, для которой $l=m=0$. Следующее состояние имеет $n=2$, ему соответствуют четыре возможных состояния. Радиальная функция имеет один узел и $l=1$; в этом случае m может принимать значения $-1, 0, 1$. Может также быть два узла радиальной функции ($N=2$) и $l=m=0$. При больших главных квантовых числах степень вырождения возрастает.

Свойством независимости энергии от l обладает только атом водорода и трехмерный изотропный гармонический осциллятор*). Например, в атомах, отличных от атома водорода, энергия зависит не только от n , но и от l . Это вызвано тем, что потенциальная энергия данного электрона в неводородном атоме равна не $-Ze^2/r$, а изменена экранирующим действием других электронов. Чем больше отклонение от кулоновского потенциала, тем больше будет различие в энергии между уровнями с одним и тем же n , но разными l . Так как наибольшие отклонения характерны для наиболее тяжелых атомов, то в общем случае стремление к возрастанию различий между энергетическими уровнями с одним и тем же n и различными l возрастает с ростом номера атома. Даже в атоме водорода вырождение уровней с одним и тем же n можно удалить наложением внешнего электрического поля, которое вызывает изменение энергии каждого уровня на величину, зависящую от l . Это явление называется эффектом Штарка первого порядка; он будет обсуждаться позже в связи с теорией возмущений (см. гл. 19, п. 11). Влияния спина и релятивистских эффектов также вызывают небольшое расщепление этих уровней, называемое тонкой структурой.

Вырождение уровней с одними и теми же l и n , но с различными m присуще всем центральным полям, т. е. всем потенциалам, зависящим только от радиуса. Это ясно из того, что радиальное уравнение (15.26), определяющее возможные энергии, не содержит m ,

*) Обсуждение явления вырождения в рамках классической и старой квантовой теорий см. в гл. 2, п. 14.

а содержит только полный момент количества движения, определяемый квантовым числом l . Однако это вырождение исчезает, когда поле не является центральным. Такое нецентральное поле можно создать, например, внешним магнитным полем, которое приводит к тому, что энергетические уровни с различными m приобретают различную энергию. Это расщепление энергетических уровней во внешнем магнитном поле называется эффектом Зеемана, который будет исследован в п. 27.

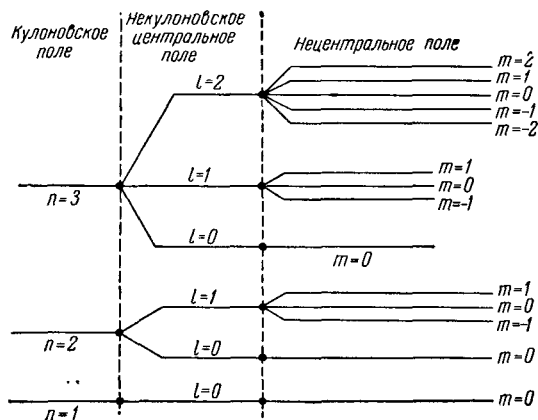


Рис. 73.

На рис. 73 представлена схематическая диаграмма, указывающая вырождение различных энергетических уровней атома водорода и способы снятия этого вырождения.

Надо отметить, что и знаки, и величины различных смещений энергетических уровней могут меняться в зависимости от типа взаимодействия, вызывающего расщепление уровней.

14. Полиномы Лагерра и присоединенные полиномы Лагерра. Полиномы, являющиеся решением уравнения (15.18), изучались независимо от задачи об атоме водорода Лагерром задолго до того, как было выведено уравнение Шрёдингера. Полиномы Лагерра являются частными случаями класса так называемых вырожденных гипергеометрических функций.

Полиномы Лагерра определяются следующим образом (см. [10], стр. 130—132):

$$L_r(\rho) = e^\rho \frac{d^r}{d\rho^r} (\rho^r e^{-\rho}). \quad (15.23)$$

Присоединенные функции Лагерра получают дифференцированием полиномов Лагерра:

$$L_r^s(\rho) = \frac{d^s}{d\rho^s} L_r(\rho). \quad (15.24)$$

Легко доказать прямой подстановкой, что эти функции удовлетворяют уравнению

$$L_r^{s''}(\rho) + \left(\frac{s+1}{\rho} - 1\right) L_r^{s'}(\rho) + \frac{(r-s)}{\rho} L_r^s(\rho) = 0. \quad (15.25)$$

Если положить $U = x^{l+1}v$, то из уравнения (15.18) получим

$$v'' + \left[\frac{2(l+1)}{x} - 2\sqrt{W}\right]v' + \frac{[k - 2\sqrt{W}(l+1)]}{x}v = 0. \quad (15.26a)$$

k определяется из уравнения (15.19д) $k = 2\sqrt{W}(N+l) = 2\sqrt{W}n$. Учтя это соотношение и совершив подстановку $z = 2\sqrt{W}x$, получим из уравнения (15.26a)

$$\frac{d^2v}{dz^2} + \left[\frac{2(l+1)}{z} - 1\right]\frac{dv}{dz} + \frac{n - (l+1)}{z}v = 0. \quad (15.26б)$$

Если выбрать $r = n + l$, $s = 2l + 1$, $\rho = z = 2\sqrt{W}x$, то уравнения (15.26б) и (15.25) становятся идентичными. Поэтому получаем

$$v = L_{n+l}^{2l+1}(2\sqrt{W}x). \quad (15.27)$$

Полное решение волнового уравнения имеет вид

$$\psi_{n,l}^m(x) \sim e^{-\sqrt{W}x} x^l L_{n+l}^{2l+1}(2\sqrt{W}x) Y_l^m(\vartheta, \varphi). \quad (15.28)$$

Волновую функцию можно нормировать с помощью соотношения ([10], ст. 451)

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l} [L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2 \rho^2 d\rho = \frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!}. \quad (15.29)$$

Вернемся теперь к r , как независимой переменной. Используем подстановки

$$x = \sqrt{2\mu} \frac{r}{\hbar}, \quad \sqrt{W} = \frac{k}{2n} = \sqrt{2\mu} \frac{e^2}{2n\hbar}.$$

Введем обозначения $a_0 = \hbar^2/\mu e^2$ для радиуса первой боровской орбиты. В итоге получаем

$$\psi_{n,l}^m \sim e^{-r/na_0} \left(\frac{r}{a_0}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) Y_l^m(\vartheta, \varphi). \quad (15.30)$$

Для частного случая $n = l + 1$ вышеприведенную волновую функцию объяснить особенно легко, поскольку этот случай ближе всего соответствует классической круговой орбите. Из уравнения (15.24) ясно, что для получения постоянной полином степени $(2l+1)$ надо дифференцировать $2l+1$ раз. Конечным результатом является

$$\psi_{l+1,l}^m \sim e^{-r/na_0} \left(\frac{r}{a_0}\right)^l Y_l^m(\vartheta, \varphi). \quad (15.31)$$

График функции $g(r) = f(r)/r$ схематически показан на рис. 74 (сравнить с рис. 72). Максимум соответствует значению

$$r = n(l+1)a_0 = n^2a_0.$$

Но это как раз совпадает с радиусом n -й боровской орбиты ранней квантовой теории. Таким образом, мы видим, как волновая функция приводит к старым боровским орбитам. Когда $n > l+1$, то волновая функция представляется полиномом, умноженным на e^{-r/na_0} . Поэтому она будет иметь несколько колебаний, т. е. обладать именно теми свойствами, которые были уже без доказательства упомянуты при качественном обсуждении формы волновой функции.

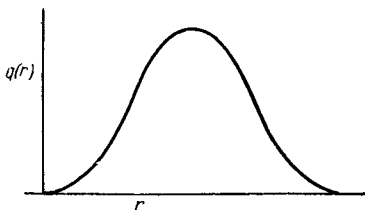


Рис. 74.

Задача 5. Для радиальных волновых функций $g_n^l(r)$ показать их ортогональность в том смысле, что

$$\int g_n^l(r) g_{n'}^l(r) dr = 0, \text{ когда } n \neq n'.$$

Могут ли они быть ортогональными для различных величин l ? Ответ объяснить.

Задача 6. Выразить произвольную волновую функцию в виде ряда по собственным функциям атома водорода и показать способ расчета коэффициентов в разложении. Обратить внимание на то, что надо и интегрировать по континууму волновых функций, соответствующих $E > 0$, и суммировать по дискретным уровням связанных состояний. К вопросу о непрерывных уровнях см. гл. 21, пп. 58 и 59.

15. Трехмерный гармонический осциллятор. До сих пор рассматривался лишь одномерный гармонический осциллятор (см. гл. 13). Полезно обобщить это исследование на три измерения не только потому, что трехмерный осциллятор сам по себе представляет определенный интерес, но также и потому, что, как мы увидим, эту задачу можно решить двумя различными способами, каждый из которых демонстрирует определенный важный квантовомеханический принцип.

В механике показано, что всегда можно выбрать такую систему координат, в которой потенциальная энергия трехмерного гармонического осциллятора равна

$$V = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (15.32)$$

где ω_x , ω_y , ω_z — соответственно угловые частоты x -, y - и z -компонент колебания. В общем случае все эти три величины могут быть различными. Координатные оси, по отношению к которым потенциал

принимает эту относительно простую форму, называются главными осями. В общем случае, когда оси не являются главными, потенциал принимает форму $\sum A_{ij}x_i x_j$, где $x_i = x, y, z$ соответственно для $i = 1, 2, 3$.

Примером трехмерного гармонического осциллятора может служить атом в кристалле. Для такого атома в кристаллической решетке есть положение равновесия, около которого атом совершает простое гармоническое движение, когда он подвергается слабому возмущению. Если кристалл анизотропен, то все угловые частоты колебания вдоль главных осей кристалла различны. Для изотропного кристалла все три значения ω одинаковы, и мы получаем

$$V = \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{m\omega^2 r^2}{2}. \quad (15.33)$$

Таким образом, в общем случае V не является радиально симметричной функцией, за исключением того случая, когда все три частоты ω равны.

Уравнение Шрёдингера в общем случае имеет вид

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \right] \psi = 0. \quad (15.34)$$

Это уравнение можно решить, разделив переменные. Ищем решение в виде

$$\psi = X(x) Y(y) Z(z). \quad (15.35)$$

Тогда уравнение (15.34) переписывается так:

$$\left[\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} - \left(\frac{m\omega_x^2 x^2}{\hbar} \right)^2 \right] + \left[\frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} - \left(\frac{m\omega_y^2 y^2}{\hbar} \right)^2 \right] + \left[\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} - \left(\frac{m\omega_z^2 z^2}{\hbar} \right)^2 \right] = -\frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (15.36)$$

Для нахождения решения надо, чтобы каждая из трех вышеприведенных скобок равнялась по отдельности постоянной. Эти постоянные мы обозначим соответственно через

$$-\frac{2m}{\hbar^2} E_x, \quad -\frac{2m}{\hbar^2} E_y, \quad -\frac{2m}{\hbar^2} E_z.$$

Тогда получаем уравнения

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2 X}{dx^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} E_x - \left(\frac{m\omega_x^2}{\hbar} x^2 \right) \right] X &= 0, \\ \frac{d^2 Y}{dy^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} E_y - \left(\frac{m\omega_y^2}{\hbar} y^2 \right) \right] Y &= 0, \\ \frac{d^2 Z}{dz^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} E_z - \left(\frac{m\omega_z^2}{\hbar} z^2 \right) \right] Z &= 0, \\ E &= E_x + E_y + E_z. \end{aligned} \right\} \quad (15.37)$$

Каждое уравнение аналогично уравнению для одномерного гармонического осциллятора, поэтому энергии равны

$$E_x = \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2}\right), \quad E_y = \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2}\right), \quad E_z = \hbar\omega_z \left(n_z + \frac{1}{2}\right). \quad (15.38)$$

16. Возможность вырождения энергетических уровней. Если частоты $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ различны, то нет двух совпадающих уровней, если только между частотами ω нет линейной связи вида

$$\gamma_x \omega_x + \gamma_y \omega_y + \gamma_z \omega_z = 0,$$

где $\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z$ — целые числа (которые могут быть либо положительными, либо отрицательными). Если такое соотношение существует, то частоты ω называются линейно зависимыми; в противном случае они — линейно независимы.

Ясно, что если частоты ω линейно зависимы, то всегда можно найти новый уровень с той же самой энергией, что и данный, добавив γ_x к n_x , γ_y к n_y и γ_z к n_z , потому что в этом случае энергия равна $E = (E_x + E_y + E_z) = \hbar[(n_x + \gamma_x)\omega_x + (n_y + \gamma_y)\omega_y + (n_z + \gamma_z)\omega_z] + \frac{\hbar}{2}(\omega_x + \omega_y + \omega_z) = \hbar(n_x\omega_x + n_y\omega_y + n_z\omega_z) + \frac{\hbar}{2}(\omega_x + \omega_y + \omega_z)$.

Итак, если все частоты ω линейно зависимы, то система будет вырожденной.

17. Случай сферической симметрии. Еще больше возможностей для вырождения имеется в том случае, когда все частоты ω равны. Тогда мы получаем

$$E = \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right). \quad (15.39)$$

Если мы примем $n_x + n_y + n_z = N$, то степень вырождения уровня равна числу способов, которыми можно выразить N как сумму трех неотрицательных целых чисел. Например, для $N=0$ уровень невырожден; для $N=1$ уровень трижды вырожден (n_x, n_y или n_z могут быть равны 1); для $N=2$ он шестикратно вырожден и т. д.

18. Вид волновой функции в случае сферической симметрии. Волновые функции являются просто произведениями трех собственных функций одномерных осцилляторов. Поэтому для ненормированных функций получаем (см. уравнение (13.28))

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2 + y^2 + z^2)\right] \times \\ \times h_{n_x}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) h_{n_y}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}y\right) h_{n_z}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}z\right). \quad (15.40)$$

Эта собственная функция соответствует квантовым числам n_x, n_y, n_z .

19. Важное свойство вырожденных собственных функций. Если из данной совокупности все функции ψ принадлежат одному

и тому же энергетическому уровню, то они обладают следующим важным свойством: любая линейная комбинация, построенная из этой совокупности функций ψ , также принадлежит тому же самому энергетическому уровню. Например, пусть $\psi_{i,n}$ является i -й функцией совокупности собственных функций, принадлежащих энергетическому уровню E_n . Тогда волновая функция $U = \sum_i A_i \psi_{in}$, где A_i — произвольные постоянные, тоже принадлежит уровню E_n . Доказательство этого положения очевидно. Действительно, легко убедиться, что

$$HU = \sum_i A_i H \psi_{in} = \sum_i A_i E_n \psi_{in} = E_n \sum_i A_i \psi_{in} = E_n U.$$

20. Связь полиномов Эрмита — Чебышева со сферическими гармониками. Здесь надо отметить, что если потенциал V является функцией только радиуса, то через него может быть выражено решение в виде произведения функции, зависящей только от радиуса, и сферической гармоники, как было сделано, например, в случае атома водорода. Такое решение можно получить из радиального уравнения, но мы возьмем это выражение непосредственно из решения (15.40). Рассмотрим сначала простейшие случаи.

Случай 1: $n_x = n_y = n_z = 0$. В этом случае волновая функция будет

$$\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right).$$

Так как ψ не является функцией от ϑ и φ , то ясно, что наинизшим состоянием является s -состояние. Таким образом, функция уже выражена в виде произведения функции, зависящей только от радиуса, и нулевой сферической гармоники.

Случай 2: первое возбужденное состояние. Как уже было показано, этот уровень трижды вырожден. Может быть, что n_x , n_y или $n_z = 1$, в то время как все остальные равны нулю. Соответственно имеем три ненормированные собственные функции (см. выражение (13.28) для $h_n(x)$ и т. д.):

$$\left. \begin{aligned} n_x = 1: & \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] x = r \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] \sin \vartheta \cos \varphi \sim \\ & \sim r \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] [Y_1^1(\vartheta, \varphi) + Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi)]; \\ n_y = 1: & \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] y = r \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] \sin \vartheta \sin \varphi \sim \\ & \sim r \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] [Y_1^1(\vartheta, \varphi) - Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi)]; \\ n_z = 1: & \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] z = r \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] \cos \vartheta \sim \\ & \sim r \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] Y_1^0(\vartheta, \varphi). \end{aligned} \right\} \quad (15.41)$$

(См. уравнение (14.71), где определена функция $Y_1^m(\vartheta, \varphi)$.) Составляя подходящие линейные комбинации из трех вырожденных собственных функций, можно получить волновые функции, являющиеся просто произведениями функций, зависящих только от радиуса, и сферических гармоник. Это дает

$$\left. \begin{aligned} \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right](x+iy) &\sim r \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] \sin\vartheta \exp(i\varphi) \sim \\ &\sim r \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] Y_1^1(\vartheta, \varphi); \\ \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right](x-iy) &\sim r \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] \sin\vartheta \exp(-i\varphi) \sim \\ &\sim r \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi); \\ \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] z &\sim r \exp\left[-\left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)\right] Y_1^0(\vartheta, \varphi). \end{aligned} \right\} \quad (15.42)$$

Для более высоких возбужденных состояний применяются аналогичные методы. Например, в случае второго возбужденного состояния мы можем добавить или множители $h_2(x)$, $h_2(y)$, $h_2(z)$, или произведения типа $h_1(x)h_1(y)$. Все эти полиномы можно выразить через функции от r , ϑ и φ . Сделав это, мы обнаружим, что для второго возбужденного состояния множители, зависящие от углов, содержат $Y_2^m(\vartheta, \varphi)$ и Y_0 . Шесть вырожденных состояний можно тогда выразить в виде пяти состояний с $l=2$ и одного состояния с $l=0$.

Если три частоты ω не равны, то потенциал V не является функцией только радиуса r , и тогда нельзя выразить волновую функцию в виде простых произведений функций, зависящих только от радиуса, и сферических гармоник. Например, волновая функция наинизшего состояния будет иметь вид

$$\exp\left[-\frac{m}{2\hbar}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)\right].$$

Эту функцию невозможно записать как функцию от r , умноженную на сферическую гармонику.

Различным волновым функциям можно придать простой физический смысл. Например, для случая $n_z=1$, соответствующего колебанию только в направлении оси z , угловая часть функции равна $Y_1^0(\vartheta, \varphi)$, поэтому в данном случае отсутствует z -составляющая момента количества движения, как и следовало ожидать. Для случая $n_y=1$, соответствующего колебанию в направлении оси y , равновероятно, что $L_z = \pm \hbar$ (см. гл. 14, п. 17). Следовательно, хотя средняя величина L_z равна нулю (как и следовало ожидать), это нулевое значение обусловлено тем, что L_z с равной вероятностью может быть как $+1$, так и -1 . Вышеприведенный результат

показывает, что, хотя частица и движется только в направлении оси y , она может находиться с любой стороны от начала координат и поэтому может иметь положительную или отрицательную составляющую момента количества движения.

21. Гамильтониан заряженной частицы в заданном электромагнитном поле. Обобщим теперь предыдущую теорию на задачу о движении заряженной частицы в заданном внешнем электромагнитном поле. Другими словами, предположим, что электромагнитное поле целиком создается внешними зарядами и токами, и пренебрежем полями, создаваемыми зарядом, который мы изучаем. Такая задача может возникнуть, например, когда атом находится во внешнем магнитном поле или когда атом облучается светом, испускаемым другими атомами. Наша цель здесь будет заключаться в том, чтобы показать, как квантовомеханически сформулировать такую задачу.

Первый шаг будет заключаться в том, чтобы получить классическую гамильтоновскую функцию. Как мы увидим в задаче 7, с помощью векторного потенциала $\mathbf{A}(x, y, z, t)$ и скалярного потенциала $\varphi(x, y, z, t)$ этот гамильтониан можно записать в таком виде:

$$H = \frac{\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2}{2m} + V(\mathbf{x}) + e\varphi, \quad (15.43)$$

где V — часть потенциальной энергии, имеющая неэлектромагнитное происхождение. Отметим, что единственный новый момент здесь заключается в замене вектора $\mathbf{p}$ на

$$\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}.$$

Уравнения движения получаются из канонических уравнений

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}.$$

Используя вышеприведенный гамильтониан, мы получаем для скорости

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{1}{m} \left[\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}) \right] \quad \text{или} \quad \mathbf{p} = m\dot{\mathbf{x}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}).$$

Заметим, что если векторный потенциал отличен от нуля, то канонический импульс $\mathbf{p}$ не равен больше своей обычной величине $m\dot{\mathbf{x}}$.

Задача 7. Показать, что вышеприведенный гамильтониан приводит к правильным классическим уравнениям движения, а именно:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\text{grad } V + e\mathcal{E} + \frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathcal{H}],$$

где $\mathcal{E}$ и $\mathcal{H}$ — соответственно напряженности электрического и магнитного полей.

У к а з а н и е. Использовать формулу

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{v} \operatorname{grad} A$$

и учесть, что

$$\mathbf{v} \operatorname{grad} A = -[\mathbf{v} \operatorname{rot} A] + \operatorname{grad}(\mathbf{v}A).$$

22. Квантовомеханический гамильтониан. Чтобы получить квантовомеханический гамильтониан, будем следовать обычному способу и заменим $\mathbf{p}$ повсюду, где он встречается, оператором $(\hbar/i)\nabla$. Тогда оператор Гамильтона запишется так:

$$\begin{aligned} & \frac{\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m} + e\varphi + V = \\ & = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + e\varphi + V - \frac{\hbar e}{2mci}(\mathbf{A}\nabla + \nabla\mathbf{A}) + \frac{e^2}{2mc^2}A^2. \end{aligned} \quad (15.44)$$

23. Сохранение вероятности. Ток вероятности. Очевидно, что вышеприведенный гамильтониан — эрмитовский, так что вероятность сохраняется. Тем не менее полезно вычислить изменение вероятности, чтобы получить выражение для тока вероятности. Используя выражение $i\hbar(\partial\psi/\partial t) = H\psi$, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} = \\ &= -\frac{\psi}{2mi\hbar}\left(-\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\left(-\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi^* + \\ & \quad + \frac{\psi^*}{2mi\hbar}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi. \end{aligned}$$

После несложных алгебраических преобразований вышеприведенное выражение примет вид

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \operatorname{div} \left[\frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \operatorname{grad} \psi - \psi \operatorname{grad} \psi^*) - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \psi^* \psi \right] = 0. \quad (15.45)$$

Если ввести обозначения

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \operatorname{grad} \psi - \psi \operatorname{grad} \psi^*) - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \psi^* \psi, \quad (15.46)$$

то получим

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{S} = 0.$$

Таким образом, при наличии векторного потенциала для сохранения заряда надо изменить определение тока.

Задача 8. Доказать уравнения (15.45) и (15.46).

24. Классический предел. Мы не доказали, что в классическом пределе уравнение Шрёдингера переходит в ньютоновские законы

движения и при наличии векторного потенциала. Это можно сделать так же, как и в отсутствие векторного потенциала, однако такое доказательство оставим читателю в качестве упражнения.

Задача 9. Показать, что средние x и p удовлетворяют классическим законам движения только при наличии векторного потенциала.

25. Градиентная (калибровочная) инвариантность. Выясним теперь, инвариантна ли наша теория к градиентному преобразованию (см. гл. 1, п. 3). Другими словами, физические результаты не должны меняться, когда потенциалы претерпевают градиентное преобразование. Если это требование не удовлетворяется, то в общем случае уравнения движения в классическом пределе должны были бы меняться при градиентном преобразовании, вопреки известному факту, что они не изменяются при таком преобразовании. В связи с этим надо заметить, что даже классический канонический импульс

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + \frac{e}{c} \mathbf{A}$$

зависит от выбора градиентного преобразования. Физический смысл имеют лишь те величины, которые удовлетворяют градиентной инвариантности. В данном случае градиентно инвариантной величиной является скорость $\mathbf{v} = \frac{1}{m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)$.

Задача 10. Доказать, что скорость инвариантна относительно классического градиентного преобразования.

В квантовой теории не существует понятия «скорость» (см. гл. 8, п. 6). Вместо него имеется лишь понятие средней скорости, которая является средней величиной оператора $\frac{1}{m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)$. Как и в случае с нулевым векторным потенциалом, этот оператор можно определить, только когда положение электрона определено не слишком точно.

Чтобы продемонстрировать свойство градиентной инвариантности величин, имеющих физический смысл, запишем полное уравнение Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi + (e\varphi + V) \psi. \quad (15.47)$$

Проведем теперь градиентное преобразование *). Уравнение Шрёдингера принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{e}{c} \text{grad } f - \frac{e}{c} \mathbf{A}' \right)^2 \psi + (e\varphi' + V) \psi + \frac{e}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \psi.$$

*) Градиентное преобразование заключается в следующем: $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' - \text{grad } f$, $\varphi \rightarrow \varphi' + \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}$ (см. гл. 1, п. 3).

Легко показать, что это уравнение эквивалентно следующему:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{ief/\hbar} \psi) = \frac{1}{2m} \left(\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}' \right) (e^{ief/\hbar} \psi) + (e\varphi' + V) (e^{ief/\hbar} \psi). \quad (15.48)$$

Поэтому в представлении новых потенциалов $\mathbf{A}'$ и φ' новая волновая функция $\psi' = e^{ief/\hbar} \psi$ удовлетворяет тому же волновому уравнению, которому удовлетворяла ранее сама функция ψ . Поэтому функция $e^{ief/\hbar} \psi$ является новым решением. При этом следует заметить, что вероятность оказывается одной и той же как для этой новой функции, так и для старой. Более того, ток вероятности как для ψ' и $\mathbf{A}'$, так и для ψ и $\mathbf{A}$ оказывается одинаковым.

Задача 11. Доказать это утверждение.

Можно показать, что выражения для всех физически наблюдаемых величин остаются также одинаковыми, т. е. не изменяются при градиентном преобразовании. Поэтому можно сделать вывод, что в квантовой теории, как и в классической, градиентное преобразование не приводит к новым физическим результатам.

26. Частный случай: однородное магнитное поле. Легко проверить, что указанный ниже выбор магнитного потенциала приводит к однородному магнитному полю $\mathcal{H}$, направленному по оси z :

$$A_x = \frac{\mathcal{H}y}{2}, \quad A_y = -\frac{\mathcal{H}x}{2}, \quad A_z = 0.$$

Задача 12. Доказать это утверждение. Доказать также, что потенциалы $A_x = \mathcal{H}y/2$, $A_y = -\mathcal{H}x/2$, $A_z = 0$ приводят к тому же самому магнитному полю. Показать, что эти два потенциала связаны градиентным преобразованием, и найти это градиентное преобразование.

Другим примером градиентного преобразования может служить исключение скалярного потенциала φ для поля излучения в вакууме. (Это было показано в гл. 1, п. 3 в связи с введением осцилляторов излучения.)

Гамильтониан при постоянном магнитном поле. С учетом вышеприведенных потенциалов гамильтониан принимает вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{e\mathcal{H}}{2mc} \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{e^2}{8mc^2} \mathcal{H}^2 (x^2 + y^2) + V. \quad (15.49)$$

27. Зеемановское расщепление энергетических уровней с различными квантовыми числами m . С помощью гамильтониана (15.49) можно решить ряд задач, например, вычислить зеемановское расщепление энергетических уровней в магнитном поле. Для этого выразим оператор H в сферических полярных координатах:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right) + \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8\mu^2 c^2} \rho^2 + V(r), \quad (15.50)$$

где $\rho^2 = x^2 + y^2$, μ — приведенная масса. Заметим, что $V(r)$ — сферически симметричный потенциал, имеющий, как предполагается, обычный для атомов вид. Вышеуказанный гамильтониан приводит к волновому уравнению, отличающемуся в двух отношениях от уравнения в случае отсутствия магнитного поля.

1) Появляется член $\frac{e\hbar}{2\mu c} \frac{\mathcal{H}}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$, который пропорционален полю и добавляется к H .

2) К эффективному потенциалу добавляется член $\frac{e^2 \mathcal{H}^2}{2\mu c^2} \rho^2$. Последний член включает в себя сомножитель $\mathcal{H}^2$, поэтому для слабых магнитных полей он дает поправку второго порядка, которой можно пренебречь. Если ограничиться учетом эффектов первого порядка, то в гамильтониане следует сохранить лишь один добавочный член, а именно $\frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$. Отметим, однако, что в этом приближении гамильтониан по-прежнему коммутирует с операторами L^2 и L_z , так что собственные значения L^2 , L_z и H можно определить одновременно. Предположим, что $L^2 = l(l+1)\hbar^2$ и $L_z = m\hbar$, тогда находим

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} \hbar m + V(r). \quad (15.51)$$

Отсюда мы видим, что единственное влияние магнитного поля заключается в добавлении к энергии постоянной величины, пропорциональной магнитному квантовому числу m . Следовательно, поскольку уровни с различными m имеют теперь различные энергии, часть вырождения снимается; это показано на рис. 73. В первом приближении волновые функции не меняются, так как если пренебречь членом $\frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8\mu^2 c^2} \rho^2$, то радиальное волновое уравнение остается точно тем же самым, как и ранее.

Факт изменения энергетических уровней можно объяснить очень просто. Легко показать (см., например, [11], стр. 384), что электрон, вращающийся по орбите с моментом количества движения L , имеет магнитный момент $M = eL/2\mu c$. Энергия магнитного момента в магнитном поле $\mathcal{H}$ равна

$$W = M\mathcal{H} = \frac{eL\mathcal{H}}{2\mu c} = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} L_z \quad (15.52)$$

(предполагается, что поле $\mathcal{H}$ направлено вдоль оси z). Приняв $L_z = m\hbar$, находим

$$W = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} \hbar m. \quad (15.53)$$

Магнитный момент электрона с единичным механическим моментом $\hbar$ называется *магнетоном Бора*. Он равен $e\hbar/2\mu c$. Таким образом,

магнитный момент электрона в атоме равен целому числу, умноженному на магнетон Бора.

Полученное выше расщепление энергетических уровней приводит к расщеплению и спектральных линий, излучаемых атомом. Это расщепление называется *эффектом Зеемана*, для изложения полной теории его надо рассмотреть сначала влияние спина электрона. (Эффект Зеемана без учета влияния спина будет рассмотрен в гл. 18. Теорию эффекта Зеемана с учетом влияния спина см. в [11], стр. 399, а также в [40].)

Квадратный член $\frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8\mu c^2} \rho^2$ может играть роль в случае очень сильных магнитных полей, когда он приводит к общему сдвигу и перераспределению энергетических уровней, что связано с эффектом Пашена — Бака (см. [40]).

МАТРИЧНАЯ ФОРМУЛИРОВКА КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

До сих пор математический аппарат квантовой теории и ее физическая интерпретация излагались с помощью волновой функции $\psi(x)$ и линейных операторов, которые действуют на эту функцию и которые в общем случае являются комбинациями функций от x и $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. В этой главе будет развита иная формулировка квантовой механики, впервые предложенная Гейзенбергом, в которой операторы выражаются таблицами чисел, называемыми матрицами. Будет показана также эквивалентность этих двух формулировок. Преимущество матричной формулировки заключается в ее большей общности, а недостаток — большие трудности при применениях для решения специальных сложных задач, таких, например, как задача по определению стационарных состояний атомов.

1. Матричное представление оператора. Чтобы получить оператор A в матричном представлении, рассмотрим сначала некоторую волновую функцию $\psi_m(x)$, которая входит в совокупность полной ортонормированной системы волновых функций $\psi_n(x)$. Например, ψ_n может быть $\exp(2\pi i n x/L)$, если мы рассматриваем ортонормированную систему, включающую в себя ряд гармонических функций, или же $\exp(-x^2/2) h_n(x)$, где h_n — полином Эрмита — Чебышева. Рассмотрим теперь новую волновую функцию $\varphi_m(x)$, полученную действием оператора A на $\psi_m(x)$, т. е.

$$A\psi_m(x) = \varphi_m(x).$$

Так как ψ_n образует полную ортонормированную систему, то возможно разложить функцию φ_m в ряд по ψ_n :

$$A\psi_m(x) = \varphi_m(x) = \sum_n a_{nm} \psi_n(x). \quad (16.1)$$

Если числа a_{nm} известны для всех m и n , то действие оператора A на любую волновую функцию $\psi = \sum_m C_m \psi_m$ можно представить следующим образом:

$$A\psi = A \sum_m C_m \psi_m = \sum_m C_m A\psi_m = \sum_n \sum_m C_m a_{nm} \psi_n.$$

Более того, если оператор A задан, то числа a_{nm} всегда можно найти. Чтобы определить a_{nm} , надо просто умножить уравнение (16.1) на $\psi_r^*(x)$ и проинтегрировать по всем x . Пользуясь условиями нормировки и ортогональности функций ψ_n , находим

$$a_{rm} = \int \psi_r^*(x) A \psi_m(x) dx. \quad (16.2)$$

Числа a_{nm} , в общем случае являющиеся комплексными, образуют прямоугольную таблицу чисел, которая схематически записывается в таком виде:

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & a_{1,4} & . & . \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & . & . & . \\ a_{3,1} & a_{3,2} & . & . & . & . \\ a_{4,1} & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \end{bmatrix}$$

Легко показать, что совокупность чисел a_{mn} обладает всеми свойствами таких величин, которые называются в математике матрицами. Каждое число a_{mn} называется *элементом* (или *компонентой*) матрицы. Для обозначения всей суммы матричных элементов часто используется символ A , ее также выражают в виде (a_{mn}) . Матричные элементы можно обозначить или через (A_{nm}) , или a_{mn} .

2. Свойства матриц. Важнейшими свойствами матриц являются следующие.

1) Две матрицы (a_{mn}) и (b_{mn}) можно складывать, в результате получается новая матрица, элементы которой являются суммами соответствующих элементов отдельных матриц

$$(A + B)_{mn} = a_{mn} + b_{mn}. \quad (16.3)$$

2) Матрицу (a_{mn}) можно умножить на произвольное комплексное число, причем образуется новая матрица, а именно

$$(KA)_{mn} = K a_{mn}. \quad (16.4)$$

3) Две матрицы равны только в том случае, если каждый элемент первой равен соответствующему элементу второй. Далее, матрица равна нулю, только когда все ее элементы равны нулю.

4) Две матрицы можно перемножить следующим образом:

$$(AB)_{mn} = \sum_r a_{mr} b_{rn}. \quad (16.5)$$

Пример. Рассмотрим формулу для вращения вектора с компонентами x_1 и x_2 на угол ϑ_1 вокруг оси, нормальной к x_1 и x_2 . В результате получим

$$\left. \begin{aligned} x_1 &= x'_1 a_{1,1} + x'_2 a_{1,2}, \\ x_2 &= x'_1 a_{2,1} + x'_2 a_{2,2}, \end{aligned} \right\} \quad (16.6)$$

где

$$a_{1,1} = \cos \vartheta_1, \quad a_{1,2} = -\sin \vartheta_1, \quad a_{2,1} = \sin \vartheta_1 \quad \text{и} \quad a_{2,2} = \cos \vartheta_1.$$

Коэффициенты a_{ij} образуют квадратную таблицу

$$\begin{pmatrix} \cos \vartheta_1 & -\sin \vartheta_1 \\ \sin \vartheta_1 & \cos \vartheta_1 \end{pmatrix}. \quad (16.7a)$$

Преобразование (16.6) удобно записать в виде

$$x_i = \sum_j a_{ij} x'_j. \quad (16.7b)$$

Рассмотрим второй поворот на угол ϑ_2 , который определяется преобразованием

$$x'_j = \sum_k b_{jk} x''_k, \quad (16.7b)$$

где b_{jk} образуют квадратную таблицу

$$\begin{pmatrix} \cos \vartheta_2 & -\sin \vartheta_2 \\ \sin \vartheta_2 & \cos \vartheta_2 \end{pmatrix}.$$

Заменяя координаты x'_j в уравнении (16.7b) на результат их преобразования по уравнению (16.7b), получим

$$x_i = \sum_{j,k} a_{ij} b_{jk} x''_k. \quad (16.8)$$

Легко проверить, что $\sum_j a_{ij} b_{jk} = (AB)_{ik}$ — ik -й элемент матрицы произведения AB . Итак, применение двух последовательных поворотов дает матрицу преобразования, которую можно выразить как произведение отдельных матриц преобразования.

Задача 1. Доказать, что матрица $(AB)_{ij}$ равна

$$\begin{pmatrix} \cos (\vartheta_1 + \vartheta_2) & -\sin (\vartheta_1 + \vartheta_2) \\ \sin (\vartheta_1 + \vartheta_2) & \cos (\vartheta_1 + \vartheta_2) \end{pmatrix},$$

и показать, таким образом, что два последовательно проведенных поворота вокруг одной и той же оси эквивалентны одному результирующему повороту на угол, равный сумме углов отдельных поворотов.

Коммутация матриц. Ясно, что коммутатор двух матриц

$$(ab - ba)_{ik} = \sum_j (a_{ij} b_{jk} - b_{ij} a_{jk})$$

в общем случае не равен нулю.

Пример. Рассмотрим матрицы

$$a = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \text{ и } b = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Для них имеем

$$ba = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad ab = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},$$

так что

$$ba - ab = \begin{pmatrix} 0 & -2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Задача 2. Доказать, что коммутируют матрицы (a_{ij}) и (b_{ij}) , которые представляют вращение на углы соответственно ϑ_1 и ϑ_2 , определяемые матрицей (16.7a). Показать соответствие этого факта тому, что тот же результат получается при двух поворотах *вокруг тех же осей*, проведенных любым из двух возможных способов.

Из вышесказанного ясно, что, хотя матрицы в общем случае не коммутируют, в частных случаях они могут коммутировать.

Диагональные матрицы. Матрица (a_{ij}) , у которой все элементы равны нулю, за исключением элементов с равными индексами ($i = j$), называется *диагональной матрицей*. В квадратной таблице она выглядит следующим образом:

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a_{2,2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & a_{3,3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (16.9)$$

Диагональную матрицу всегда можно записать в виде

$$a_{ij} = a_{ii} \delta_{ij},$$

где δ_{ij} — символ, равный нулю при $i \neq j$ и единице при $i = j$. Он называется *символом Кронекера*.

Единичная матрица. Частным случаем диагональной матрицы является единичная матрица, у которой все диагональные элементы равны единице. Поэтому она имеет вид $a_{ij} = \delta_{ij}$. Единичная матрица часто обозначается символом $(1)_{ij}$. Легко показать, что умножение единичной матрицы на произвольную матрицу дает ту же самую матрицу. Так, например,

$$(M, 1)_{ij} = (1, M)_{ij} = M_{ij}. \quad (16.10)$$

Задача 3. Доказать предыдущий результат, показав, таким образом, что единичная матрица коммутирует с произвольной матрицей.

Обратная матрица. Во многих случаях можно определить обратную матрицу, которая аналогична обратной величине числа. Матрица A^{-1} , обратная матрице A , имеет следующее свойство:

$$A^{-1}A = AA^{-1} = 1. \quad (16.11)$$

Отметим, что по определению каждая матрица коммутирует со своей обратной матрицей (если последняя существует).

Чтобы получить матрицу, обратную данной, положим

$$A_{ij} = a_{ij} \quad \text{и} \quad (A^{-1})_{ij} = b_{ij}.$$

Тогда мы должны иметь

$$\sum_k a_{ik} b_{kj} = \sum_k b_{ik} a_{kj} = \delta_{ij}. \quad (16.12)$$

Уравнение (16.12) можно рассматривать как систему неоднородных линейных уравнений, определяющих b_{ij} через a_{ij} . Решая эти уравнения, запишем

$$b_{ij} = \frac{[a]_{ij}}{[a]}, \quad (16.13)$$

где $[a]$ — детерминант, образованный из элементов a_{ij} , а $[a]_{ij}$ — ij -минор этого детерминанта.

Необходимым и достаточным условием существования обратной матрицы является отличие от нуля детерминанта $[a]$.

Задача 4. Если уравнение $A^{-1}A = 1$ можно решить, то можно ли решить уравнение $AA^{-1} = 1$? Ответ доказать.

3. Обоснование матричного представления квантовомеханических операторов. Для доказательства того, что величины a_{ij} , входящие в уравнения (16.1) и (16.2), являются матрицами, необходимо лишь показать, что они удовлетворяют условиям (16.3), (16.4) и (16.5). То, что они удовлетворяют условиям (16.3) и (16.4), очевидно.

Задача 5. Доказать, что квантовомеханическим операторам соответствуют величины a_{ij} , удовлетворяющие условиям (16.3) и (16.4).

Для доказательства, что условие (16.5) также удовлетворяется, рассмотрим два оператора A и B с матричными элементами a_{ij} и b_{ij} . Произведение операторов (AB) имеет матричный элемент, определяемый выражением

$$\begin{aligned} (AB)_{ij} &= \int \psi_i^*(x) AB \psi_j(x) dx = \\ &= \int \psi_i^*(x) A \sum_k b_{kj} \psi_k dx = \sum_k a_{ik} b_{kj}. \end{aligned} \quad (16.14)$$

Но это совершенно то же самое, что получалось при умножении соответствующих матриц (см. уравнение (16.5)).

Задача 6. Доказать, что матрица единичного оператора является единичной матрицей, т. е. что

$$(1)_{mn} = \delta_{mn}.$$

4. Пример: волновые функции гармонического осциллятора. Рассмотрим представление, в котором волновая функция выражена в виде ряда волновых функций гармонического осциллятора (см. уравнение (13.22)). Матричный элемент оператора $x + ip/\hbar$ тогда легко вычислить, а именно:

$$\begin{aligned} \left(x + \frac{ip}{\hbar}\right)_{nm} &= \int \psi_n^*(x) \left(x + \frac{ip}{\hbar}\right) \psi_m(x) dx = \\ &= \int \psi_n^*(x) \left(x + \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_m(x) dx. \end{aligned}$$

Согласно уравнению (13.39), имеем

$$\left(x + \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_m(x) = \sqrt{2m} \psi_{m-1}(x).$$

В итоге получаем

$$\left(x + \frac{ip}{\hbar}\right)_{nm} = \sqrt{2m} \int \psi_n^*(x) \psi_{m-1}(x) dx = \sqrt{2m} \delta_{n, m-1}.$$

Поэтому матрица имеет вид

$$\begin{array}{c} \begin{array}{c} m \rightarrow \\ \downarrow n \end{array} \sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 & . & . & . & . \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & . & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{5} & 0 & . \\ . & . & . & . & . & . & . \end{bmatrix}. \end{array} \quad (16.15)$$

Другими словами, все элементы равны нулю, кроме находящихся в ряду справа от главной диагонали матрицы.

Задача 7. Найти матрицы для операторов $(x - ip/\hbar)$, x и p .

5. Эрмитовские матрицы и эрмитовски сопряженные матрицы. Из определения эрмитовского оператора (см. уравнение (9.23)) ясно видно, что матрица, соответствующая такому оператору, обладает следующим свойством:

$$(H)_{ij} = (H^*)_{ji}. \quad (16.16)$$

Другими словами, каждый матричный элемент равен комплексно сопряженному элементу транспонированной матрицы (элементы

которой получены путем перестановки столбцов и строк первоначальной матрицы).

Если оператор M — неэрмитовский, то можно показать, что матричные элементы эрмитовски сопряженного оператора M^+ удовлетворяют соотношению

$$(M^+)_{ij} = (M^*)_{ji}. \quad (16.17)$$

Другими словами, чтобы получить эрмитовски сопряженную матрицу, надо переставить столбцы и строки и взять комплексно сопряженное к каждому элементу.

Задача 8. Доказать уравнения (16.16) и (16.17).

6. Диагональное представление операторов. Если выбрать в качестве ортонормированной системы в уравнении (16.1) собственные функции эрмитовского оператора A , то получим *)

$$A\psi_i = a_i\psi_i = \sum_j a_i\delta_{ij}\psi_j. \quad (16.18)$$

Таким образом, каждый эрмитовский оператор можно представить в виде диагональной матрицы при условии, что волновая функция разложена в ряд по его собственным функциям.

7. Коммутативность диагональных матриц. Легко показать, что все диагональные матрицы коммутируют. Действительно, если имеем

$$a_{ij} = a_i\delta_{ij} \quad \text{и} \quad b_{ij} = b_i\delta_{ij},$$

то

$$(ab - ba)_{ij} = \sum_k (a_i\delta_{ik}b_k\delta_{kj} - b_i\delta_{ik}a_k\delta_{kj}) = 0.$$

8. Непрерывные матрицы. До сих пор мы рассматривали разложение произвольной волновой функции лишь с помощью дискретного ряда функций и поэтому получали дискретные матрицы. Если ψ разложить в ряд по непрерывным ортонормированным функциям, то получим непрерывные матрицы. В качестве примера рассмотрим интеграл Фурье. Имеем

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \varphi(k) e^{ikx} dk,$$

где ортонормированные функции образуют теперь непрерывную совокупность e^{ikx} , а $\varphi(k)$ являются соответствующими коэффициентами

*) A должен быть обязательно эрмитовским оператором потому, что лишь в этом случае применим постулат разложения.

разложения. Матричный элемент можно выразить по аналогии с уравнением (16.2) в виде

$$a_{kk'} = \frac{1}{2\pi} \int e^{-ikx} A e^{ik'x} dx;$$

$a_{kk'}$ — непрерывная функция от k и k' , но ее можно рассматривать как предел дискретной квадратной таблицы, в которой элементы по своим величинам могут все больше и больше сближаться друг с другом. Итак, мы получили представление о непрерывной матрице.

В более общем виде можно воспользоваться любой непрерывной совокупностью ψ_p :

$$a_{pp'} = \int \psi_p^* A \psi_{p'} dx. \quad (16.19)$$

Непрерывные матрицы можно истолковывать точно так же, как и дискретные матрицы. Так, оператор A можно выразить следующим образом:

$$A\psi(x) = \int C_p A_{pp'} \psi_{p'}(x) dp dp', \quad (16.20)$$

где

$$\psi(x) = \int C_p \psi_p(x) dp. \quad (16.21)$$

Легко показать, что единичная матрица превращается в δ -функцию Дирака $\delta(p - p')$, а диагональная матрица принимает вид $a(p)\delta(p - p')$. Можно вывести также следующее правило умножения непрерывных матриц:

$$(AB)_{pp'} = \int A_{pp''} B_{p''p'} dp''. \quad (16.22)$$

Задача 9. Доказать это правило умножения непрерывных матриц.

Примеры. а) В импульсном представлении p выражается диагональной матрицей

$$(p)_{kk'} = \hbar k \delta(k - k'). \quad (16.23)$$

Как показывает уравнение (10.446), δ -функцию можно выразить следующим интегралом Фурье:

$$\delta(k - k') = \lim_{K \rightarrow \infty} \int_{-K}^K e^{i(k-k')x} \frac{dx}{2\pi} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ix(k-k')} \frac{dx}{2\pi}. \quad (16.24)$$

Очень часто такое выражение δ -функции весьма удобно.

б) В координатном представлении x выражается диагональной матрицей

$$(x)_{yy'} = y\delta(y - y'). \quad (16.25)$$

в) В координатном представлении оператор p является внедиагональной матрицей. Чтобы получить матрицу p в этом представлении, можно использовать уравнение (16.2), которое определяет элемент матрицы, связанной с любыми двумя волновыми функциями. Пусть надо получить матричный элемент оператора p , связанный с собственными функциями оператора x , а именно $\delta(x - x_1)$ и $\delta(x - x_2)$. Этот матричный элемент равен *)

$$(p)_{x_1 x_2} = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_1) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x_2) dx = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_1} \delta(x_1 - x_2). \quad (16.26)$$

На первый взгляд кажется, что p — диагональная матрица, так как ее элементы равны нулю при $x \neq x'$. Но согласно п. 7, все диагональные матрицы должны коммутировать. А нам известно, что операторы p и x не коммутируют. В чем же причина такого парадокса?

Чтобы получить ответ на этот вопрос, необходимо тщательно исследовать характер сингулярных непрерывных матриц, т. е. таких, которые имеют бесконечные члены вроде $\delta(x - x')$ и $\frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x')$. Для придания этим членам физического смысла нужно рассматривать их как пределы конечных функций с острым максимумом, соответственно тому, что было показано в гл. 10, п. 14. Величина $\frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x')$ фактически является пределом функции, равной нулю при $x = x'$ и состоящей из двух смежных очень острых пиков противоположного знака, которые расположены по обе стороны от точки $x = x'$. Эта функция не является диагональной матрицей. Итак, мы видим, что некоммутативность операторов p и x сохраняется и в матричном представлении.

Задача 10. Рассматривая δ -функцию и ее производную как предел подходящих функций с острым пиком, получить с помощью непрерывных матриц перестановочное соотношение $xp - px = i\hbar$.

Задача 11. Получить матричное выражение оператора D , которое представляется уравнением

$$D\psi(x) = \psi(x + C),$$

где C — постоянная,

- а) в координатном представлении;
- б) в импульсном представлении.

9. Матричное представление волновой функции в виде столбца. Предположим, что в каком-то представлении мы имеем

$$\psi(x) = \sum_n C_n \psi_n(x).$$

*) δ -функции не нормированы в обычном смысле, а нормированы так, что их интеграл равен единице (см. гл. 10, п. 14). Такая нормировка более удобна для оператора с непрерывной совокупностью собственных значений. Можно непосредственно показать, что обычные формулы для умножения матриц включают этот случай.

Волновая функция задана определением всех коэффициентов C_n . Их можно записать в виде столбца

$$\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ \vdots \\ C_n \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix}. \quad (16.27)$$

Эта запись эквивалентна обобщению понятия вектора на пространство с бесконечным числом измерений. Если представить себе одну ось для каждой функции ψ_n , то каждый C_n соответствует комплексной составляющей вектора в направлении этой оси.

Матричные операции с волновыми функциями можно теперь представить как линейное преобразование. Так, например, в трех измерениях преобразование $x'_i = \sum_j a_{ij} x_j$ дает в общем случае какую-то комбинацию из вращения, сдвига и растяжения. В квантовой теории мы просто обобщаем это понятие на пространство с бесконечным числом измерений, определяемое составляющими C_n . Величину

$$A\psi = \sum_{m,n} C_n a_{mn} \psi_m = \sum_m C'_m \psi_m$$

можно выразить новым вектором $C'_m = \sum_n a_{mn} C_n$. Поэтому каждый линейный оператор соответствует операции, заменяющей каждый вектор каким-то другим вектором.

В непрерывном представлении столбец (16.27) заменяется непрерывной функцией $C(\alpha)$ собственных значений α , которым соответствует ортонормированная совокупность функций.

10. Нормировка и ортогональность волновых функций, выраженных в виде столбцов. Чтобы получить условия нормировки волновых функций, выраженных в виде столбцов, воспользуемся равенствами

$$\int \psi^* \psi dx = \int \sum_{m,n} C_m^* C_n \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \sum_{m,n} C_m^* C_n \delta_{mn} = \sum_m C_m^* C_m.$$

Эту величину можно рассматривать аналогично «длине» трехмерного вектора. Поэтому нормированная волновая функция соответствует вектору единичной «длины».

Если две волновые функции $\psi_a(x)$ и $\psi_b(x)$ ортогональны, то

$$\begin{aligned} 0 &= \int \psi_a^* \psi_b dx = \int \sum_{m,n} C_{am}^* C_{bn} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \\ &= \sum_{m,n} C_{am}^* C_{bn} \delta_{mn} = \sum_{m,n} C_{am}^* C_{bn}. \end{aligned}$$

Условие ортогональности двух волновых функций в этом случае аналогично условию перпендикулярности двух векторов в трехмерном пространстве. Это и объясняет происхождение термина «ортогональность».

11. Среднее значение оператора. Как известно, среднее значение оператора A определяется равенством

$$\bar{A} = \int \psi^* A \psi dx. \quad (16.28)$$

Его часто удобно выразить через матричные элементы a_{ij} и коэффициенты разложения C_i волновой функции. Запишем

$$\psi = \sum_i C_i \psi_i(x)$$

и получим

$$\bar{A} = \int \sum_i \sum_j C_j^* C_i \psi_j^*(x) A \psi_i(x) dx = \sum_{i,j} C_j^* a_{ji} C_i. \quad (16.29)$$

Это означает, что среднюю величину любого оператора всегда можно вычислить с помощью его матричных элементов в любом представлении при условии, что мы знаем коэффициенты разложения волновой функции в этом представлении.

12. Собственные значения и собственные векторы матриц. Чтобы получить собственные значения оператора A в матричном представлении, следует исходить из формулы $A\Psi_r = a_r\Psi_r$, где a_r — это r -е собственное значение оператора A . Разложим затем функцию Ψ_r в ряд по системе ортонормированных функций $\Psi_r = \sum_n C_n \psi_n$ и получим $\sum_n C_n A \psi_n = a_r \sum_n C_n \psi_n$. Затем умножаем это равенство почленно на ψ_m^* и интегрируем по x , в результате получаем

$$\sum_n C_n a_{mn} = a_r C_m. \quad (16.30)$$

Таким образом, мы получили систему линейных однородных уравнений, определяющих коэффициенты C_m через матричные элементы a_{mn} и собственные значения a_r . Условие разрешимости этих уравнений

сводится к равенству нулю определителя, составленного из коэффициентов у искоемых неизвестных C :

$$|a_{mn} - \delta_{mn} a_r| = 0. \quad (16.31)$$

Это уравнение часто называют *вековым*, или *секулярным*, *уравнением*.

Очевидно, что уравнение (16.31), порядок которого равен числу строк и столбцов определителя, определяет собственные значения a_r . Каждое решение дает собственное значение a_r . Если найдено какое-то значение a_r , то уравнение (16.30) можно решить для C_n и получить собственный вектор, соответствующий этому собственному значению. Собственный вектор является просто матричным представлением соответствующей собственной функции оператора A выраженным через коэффициенты ортонормированной системы функций $\psi_n(x)$.

Рассмотрим теперь в качестве примера матрицу $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. Чтобы получить ее собственные значения и собственные векторы, запишем

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix},$$

где λ — собственное значение и $\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$ — собственный вектор.

Это равенство эквивалентно следующим уравнениям:

$$\lambda C_1 - C_2 = 0 \text{ и } C_1 - \lambda C_2 = 0.$$

Условие разрешимости этой системы сводится к требованию равенства нулю определителя, составленного из коэффициентов при C , что дает

$$\lambda^2 = 1 \text{ или } \lambda = \pm 1.$$

Таким образом, два собственных значения равны $+1$ и -1 . Для каждого собственного значения получаем соответствующий собственный вектор с помощью подстановки найденной величины λ в уравнения для C . Это дает

$$\begin{aligned} C_2 &= C_1 \quad (\lambda = 1), \\ C_2 &= -C_1 \quad (\lambda = -1). \end{aligned}$$

Нормированные собственные векторы при этом равны

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ для } \lambda = 1; \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \text{ для } \lambda = -1.$$

13. Изменение представления. Предположим, что имеются матрицы, соответствующие данному ряду операторов, выраженные в каком-то представлении, и мы хотим перейти к некоторой другой

ортонормированной системе функций. Примером такого перехода является переход от x -представления к p -представлению или от p -представления к представлению в эрмитовских полиномах (см. гл. 13 п. 7). Для рассмотрения общего случая такого изменения представления предположим, что мы исходим из разложения волновой функции по какой-то полной системе функций $\psi_n(x)$, причем ради удобства будем считать, что эта система дискретна, хотя точно те же методы можно применить к случаю непрерывных систем. Итак, исходим из выражения $\psi = \sum_n C_n \psi_n(x)$. В этом представлении матрица оператора A имеет вид

$$(A)_{mn} = \int \psi_m^* A \psi_n dx. \quad (16.32a)$$

Рассмотрим теперь новую ортонормированную систему функций $\varphi_p(x)$ и связанные с ней матричные элементы $(A')_{pq} = \int \varphi_p^* A \varphi_q dx$. Наша задача заключается в том, чтобы найти связь между $(A)_{mn}$ и $(A')_{pq}$.

Для получения этой связи заметим сначала, что на основании постулата разложения функцию $\psi_n(x)$ можно разложить в ряд по системе $\varphi_p(x)$. Поэтому имеем

$$\psi_n(x) = \sum_p \alpha_{pn} \varphi_p(x). \quad (16.32b)$$

Совокупность коэффициентов α_{pn} сама по себе тоже образует матрицу, называемую матрицей преобразования.

Разложив $\psi_m^*(x)$ и $\psi_n(x)$ в уравнении (16.32a), согласно выражению (16.32b), получим

$$(A)_{mn} = \int \sum_{p,q} \alpha_{pm}^* \alpha_{qn} \varphi_p^* A \varphi_q dx = \sum_{p,q} \alpha_{pm}^* (A')_{pq} \alpha_{qn}.$$

Для придания этому выражению более удобного вида учтем, что $(\alpha^+)_{mp} = \alpha_{pm}^*$, где α^+ — эрмитовски сопряженное значение α (см. уравнение (16.17)). Тогда вышеприведенное уравнение запишется так: $(A)_{mn} = \sum_{p,q} (\alpha^+)_{mp} (A')_{pq} \alpha_{qn}$. Но это эквивалентно матричному соотношению

$$(A)_{mn} = (\alpha^+ A' \alpha)_{mn}. \quad (16.33)$$

Таким образом, мы пришли к выводу, что изменение представления можно выразить, как линейное преобразование, при котором матричный элемент $(A)_{mn}$ заменяется линейной комбинацией элементов преобразованной матрицы.

14. Важное свойство матриц преобразования (α -матриц). Их унитарный характер. Выведем теперь важное свойство α -матриц. Для этого рассмотрим выражение

$$\begin{aligned}\delta_{pq} &= \int \varphi_p^* \varphi_q dx = \int \sum_{r,s} \alpha_{rp}^* \alpha_{sq} \psi_r^* \psi_s dx = \sum_{r,s} \alpha_{rp}^* \alpha_{sq} \delta_{rs} = \\ &= \sum_r \alpha_{rp}^* \alpha_{rq} = \sum_r (\alpha^+)_{pr} \alpha_{rq} = (\alpha^+ \alpha)_{pq}. \quad (16.34)\end{aligned}$$

Отсюда видно, что $\alpha^+ \alpha$ — единичная матрица, т. е. $\alpha^+ = \alpha^{-1}$. Матрица, обладающая этим свойством, называется *унитарной* матрицей, а проведенное с помощью такой матрицы преобразование (уравнение (16.33)) называется *унитарным преобразованием*.

Аналогично можно выразить старую волновую функцию через новую с помощью уравнения (16.34). Это дает

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n = \sum_{p,n} \alpha_{p,n} C_n \varphi_p = \sum_p C'_p \varphi_p.$$

Новые коэффициенты определяются через старые соотношением

$$C'_p = \sum_n \alpha_{pn} C_n. \quad (16.35a)$$

Умножим почленно равенство (16.35a) на $(\alpha^+)_{mp}$, просуммируем по индексу p и, используя унитарный характер матрицы α , получим

$$\sum_p (\alpha^+)_{mp} C'_p = \sum_{p,n} (\alpha^+)_{mp} \alpha_{pn} C_n = \sum_n \delta_{mn} C_n = C_m. \quad (16.35b)$$

15. Значение унитарного преобразования. Важнейшие свойства унитарного преобразования следующие.

1) Нормировка произвольной волновой функции остается неизменной при унитарном преобразовании. Докажем это для произвольной волновой функции

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n(x).$$

Интегральная вероятность (которая должна быть равна единице) равна

$$\int \psi^* \psi dx = \int \sum_{m,n} C_m^* C_n \psi_m^* \psi_n dx = \sum_{m,n} C_m^* C_n \delta_{mn} = \sum_n C_n^* C_n.$$

Применив уравнения (16.35), получим

$$\sum_n C_n^* C_n = \sum_{n,p,p'} (\alpha^+)_{np}^* (\alpha^+)_{np'} C_p^* C_{p'},$$

Используем далее

$$(\alpha_{np}^+)^* = \alpha_{pn}.$$

Поэтому находим

$$\sum_n C_n^* C_n = \sum_{n, p, p'} \alpha_{pn} (\alpha^+)_{np'} C_p'^* C_{p'}' = \sum_{p, p'} \delta_{pp'} C_p'^* C_{p'}' = \sum_p C_p'^* C_{p'}'. \quad (16.36)$$

Таким образом, нормировка не меняется. В п. 10 было показано, что $\sum_n C_n^* C_n$ соответствует квадрату длины вектора матрицы (столбца), связанного с волновой функцией. Поскольку унитарное преобразование не меняет этой величины, то можно сделать вывод, что это преобразование соответствует обобщению операции поворота в трехмерном пространстве, которая также оставляет неизменной длину всех векторов. Тогда неунитарные преобразования будут соответствовать операции сдвига и растяжения.

2) Унитарное преобразование таким образом преобразует волновые функции, бывшие первоначально ортогональными, что они остаются ортогональными и в новом представлении. В этом отношении оно также напоминает операцию поворота в трехмерном пространстве, которая преобразует два взаимно перпендикулярных вектора в новую систему взаимно перпендикулярных векторов.

Для доказательства этого свойства рассмотрим следующий интеграл, равный нулю для двух ортогональных функций ψ_1 и ψ_2 :

$$\int \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx = \int \psi_2^*(x) \psi_1(x) dx = 0.$$

Если ψ разложить в ряд по функциям ψ_m , то получим

$$\psi_1 = \sum_m C_{1m} \psi_m(x) \quad \text{и} \quad \psi_2 = \sum_n C_{2n} \psi_n(x)$$

и

$$\int \psi_1^* \psi_2 dx = \int \sum_{m, n} C_{1m}^* C_{2n} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \sum_m C_{1m}^* C_{2m}.$$

При унитарном преобразовании имеем

$$C_{2m} = \sum_p (\alpha^+)_{mp} C_{1p}',$$

$$C_{1m}^* = \sum_p (\alpha^+)_{mp}^* C_{1p}'^* = \sum_p (\alpha)_{pm} C_{1p}'^*$$

и

$$\begin{aligned} \int \psi_1^* \psi_2 dx &= \sum_m C_{1m}^* C_{2m} = \sum_m \sum_{p, q} (\alpha)_{pm} (\alpha^+)_{mq} C_{1p}'^* C_{2q}' = \\ &= \sum_{m, p, q} \delta_{pq} C_{1p}'^* C_{2q}' = \sum_p C_{1p}'^* C_{2p}'. \end{aligned}$$

Таким образом, мы приходим к выводу, что разложение интеграла $\int \psi_1^* \psi_2 dx$ имеет одну и ту же форму во всех представлениях, т. е. если он равен нулю в каком-то одном представлении, он также равен нулю и после того, как над ним произвели унитарное преобразование. Следовательно, свойства ортогональности систем волновых функций остаются неизменными после унитарного преобразования.

3) Связи между преобразованными операторами остаются такими же, как и между непреобразованными операторами.

Рассмотрим для примера матричное представление оператора

$$O = AB.$$

Преобразованная матрица примет вид

$$O' = \alpha^+ (AB) \alpha = \alpha^+ A \alpha \alpha^+ B \alpha \quad (\text{в предположении, что } \alpha \alpha^+ = 1),$$

и поэтому

$$O' = A' B'.$$

Аналогичное доказательство можно провести для любой функции операторов, которая выражается в виде рядов произведений. Например, легко показать, что коммутатор двух операторов переходит в коммутатор двух преобразованных операторов, т. е.

$$(AB - BA)' = (A'B' - B'A').$$

4) Собственные значения матриц не изменяются при унитарном преобразовании.

Задача 12. Доказать это свойство.

Мы приходим к выводу, что из данного представления можно посредством унитарного преобразования получить эквивалентное представление всех квантовомеханических соотношений. Переход от одного представления к другому часто удобен, так как обычно оказывается, что каждой задаче соответствует некоторое представление, в котором она выражается проще всего. Например, средний импульс частицы проще всего вычислить в импульсном представлении, в то время как среднюю координату проще всего определить в координатном представлении *).

Задача 13. Доказать, что переход от x - к p -представлению является унитарным; определить матрицу преобразования, которая в этом случае непрерывна.

*) Преобразование между вращающимися системами координат, проведенное в гл. 14, п. 19, является примером унитарного преобразования.

Можно показать, что в классическом пределе унитарное преобразование волновых функций переходит в каноническое преобразование классических переменных p и q . Поэтому унитарное преобразование можно рассматривать как обобщение классического понятия канонического преобразования на случай квантовой механики (см. [4], стр. 121—130). Поэтому унитарное преобразование часто называют каноническим преобразованием (или контактным преобразованием).

16. След, или шпур, матрицы. Часто в расчетах очень полезной является величина, называемая *следом* (или *шпуром*) матрицы. Она определяется как сумма диагональных элементов матрицы:

$$\text{Sp } A = \sum_i A_{ii}. \quad (16.37)$$

Существует важная теорема: след матрицы не изменяется при унитарном преобразовании. След матрицы в новом представлении равен

$$\text{Sp } A' = \sum_i A'_{ii} = \text{Sp}(\alpha^+ A \alpha) = \sum_{i,j,k} \alpha_{i,j}^+ A_{jk} \alpha_{ki}.$$

Это можно переписать в виде

$$\sum_{j,k} \sum_i \alpha_{ki} \alpha_{ij}^+ A_{jk}.$$

Так как α является унитарной матрицей, то это выражение сводится к

$$\sum_{j,k} \delta_{kj} A_{jk} = \sum_k A_{kk} \sum_k A'_{kk}.$$

Итак, ясно, что след инвариантен. Это означает, что его можно вычислить в том представлении, которое окажется наиболее удобным.

Если мы выберем унитарное преобразование, которое диагонализует матрицу, то будем иметь $\text{Sp } A = \sum_i a_i$. Поэтому след матрицы также равен сумме ее собственных значений.

17. Совместные собственные функции коммутирующих операторов. Из постулата разложения вытекает, что произвольную волновую функцию можно разложить в ряд по собственным функциям эрмитовского оператора A , т. е. $\psi = \sum_a C_a \psi_a(x)$. Покажем теперь, что если два оператора коммутируют, то можно разложить произвольную волновую функцию в ряд по общим собственным функциям обоих операторов.

Для этого заметим сначала, что если A и B коммутируют и ψ_a — собственная функция A , принадлежащая собственному значению a , то

$$(AB)\psi_a - (BA)\psi_a = A(B\psi_a) - a(B\psi_a) = 0.$$

Таким образом, $B\psi_a$ также является собственной функцией A , принадлежащей собственному значению a . Это означает, что произведение $B\psi_a$ должно быть линейной комбинацией собственных функций A , принадлежащих собственному значению a . (Если A — невырожденный оператор, то может быть только одна такая функция; в противном случае — больше чем одна.) Чтобы обозначить это, запишем

$$B\psi_{am} = \sum_n b_{amn} \psi_{an},$$

где ψ_{am} представляет m -ю собственную функцию A , принадлежащую собственному значению a .

Любое семейство функций типа ψ_{an} всегда можно перегруппировать подходящей линейной комбинацией в ортонормированную систему*). Предположим, что мы воспользовались этим и совокупность функций ψ_{an} образует ортонормированную систему. Тогда можно выразить произвольную волновую функцию в виде ряда

$$\psi = \sum_{am} C_{am} \psi_{am}(x).$$

Уравнения, определяющие собственные функции и собственные значения оператора B , имеют вид

$$B\psi = \sum_{a,m,n} C_{am} b_{amn} \psi_{an}(x) = \lambda \sum_{a,m} C_{am} \psi_{am}(x).$$

Умножим это выражение почленно на $\psi_{a'm'}^*(x)$ и проинтегрируем по x . Заметим, что при $a \neq a'$ ψ_{am} ортогонально к $\psi_{a'm'}^*$, поскольку это две собственные функции эрмитовского оператора A , соответствующие различным собственным значениям (см. гл. 10, п. 24). Для $a = a'$ и $m \neq m'$ они ортогональны по предположению. Итак, мы получаем

$$\lambda C_{a'm'} = \sum_m C_{a'm} b_{a'mm'}. \quad (16.38)$$

Это система линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных $C_{a'm}$. Условием ее решения является равенство нулю определителя, составленного из коэффициентов при $C_{a'm}$:

$$|b_{a'mm'} - \lambda \delta_{mm'}| = 0. \quad (16.39)$$

Наиболее важной характеристикой уравнений (16.38) и (16.39) является то, что они относятся только к данному значению a . Это означает, что собственные функции оператора B , полученные таким

*) Это можно сделать путем так называемой операции ортогонализации Шмидта. См., например, [41], стр. 31.

образом, являются одновременно собственными функциями оператора A . Более того, так как коэффициенты C_{am} допускаются разложением произвольной функции, то этим путем можно получить полную систему собственных функций B . Очевидно, что произвольную функцию можно разложить в ряд по собственным функциям, являющимся одновременно собственными функциями и A , и B . Таким образом,

$$\psi = \sum_{a, b} C_{ab} \psi_{ab}(x). \quad (16.40)$$

Если коммутирующих операторов больше чем два, то и в этом случае можно доказать соответствующую теорему. Когда будут исчерпаны все коммутирующие друг с другом операторы, имеющие физический смысл, то мы получим «полную систему коммутирующих наблюдаемых величин». Наиболее полная возможная информация о системе получается при определении всех связанных с ними коэффициентов разложения. Только в том случае, когда мы имеем полную систему коммутирующих операторов, определение волновой функции однозначно.

В некоторых случаях полная система коммутирующих величин состоит только из одного оператора. Это имеет место, например, в одномерном случае для одной частицы без спина, когда *либо* оператор x , *либо* оператор p составляют по отдельности полную систему, но, конечно, ими нельзя пользоваться одновременно. В трехмерной задаче это будут *либо* три оператора координаты, *либо* три оператора импульса. Если потенциал сферически симметричен (см. гл. 14, п. 1), то можно выбрать операторы H , L^2 и L_z в качестве полной коммутирующей системы. Здесь необходимы три переменные, поскольку H , L^2 и L_z вырождены, так что определение только одной или двух из этих величин не может полностью определить волновую функцию. В более общем случае потенциала, не обладающего сферической симметрией (см. гл. 14, п. 6), H больше не коммутирует с L^2 и L_z . Оператор H также становится невырожденным, так что волновую функцию можно полностью определить, найдя только энергию. Однако, когда данный оператор, типа H , является вырожденным, необходимо добавить еще один или несколько операторов для образования полной системы коммутирующих величин, поскольку определение собственного значения H уже недостаточно для полного определения волновой функции.

18. Определение произвольного оператора при помощи его коммутаторов с полной системой коммутирующих операторов. Можно показать, что произвольный оператор определяется через свой коммутатор с полной системой коммутирующих наблюдаемых величин. Здесь не будет доказываться общая теорема, а будет лишь рассмотрен пример, когда один оператор образует полную

систему коммутирующих величин. Пусть это будет оператор Гамильтона в одномерном пространстве в отсутствие вырождения, как это имело место в случае гармонического осциллятора.

Оператор совершенно достаточно определить в каком-то одном представлении, так как его вид в любом другом представлении можно определить с помощью унитарного преобразования. Выберем здесь такое представление, в котором оператор H диагонален, так что $H_{ij} = \epsilon_i \delta_{ij}$. Предположим, что коммутатор произвольного оператора A с H известен, так что имеем

$$(AH - HA)_{ij} = C_{ij}.$$

Поскольку H диагонален, получаем

$$(\epsilon_j - \epsilon_i) A_{ij} = C_{ij} \quad \text{или} \quad A_{ij} = \frac{C_{ij}}{\epsilon_j - \epsilon_i}. \quad (16.41)$$

Итак, если $\epsilon_j \neq \epsilon_i$, то можно найти решение *) для матрицы A_{ij} , когда известна матрица C_{ij} . Однако, если оператор H вырожден, то он не представляет полной коммутирующей системы и для определения волновой функции необходимо знать дополнительные операторы. Как уже указывалось, можно провести более общее доказательство, которое покажет, что в этом случае можно также определить оператор A при известном $C^{**})$.

Поэтому определение коммутаторов операторов является одним из наиболее важных этапов в формулировке квантовой теории. До сих пор мы давали это определение, ограничиваясь эрмитовскими функциями x и p , которые выражаются в виде степенных рядов. Так как коммутатор p и x уже был найден в гл. 9, п. 11, то мы имеем адекватное определение для всех операторов этого общего типа. Некоторые видоизмененные правила для определения коммутаторов будут приведены в п. 23.

19. Уравнение Шрёдингера в произвольном представлении. Мы приходим, таким образом, к выводу, что выражение волновых функций и операторов через координаты x и импульсы p надо рассматривать как частные случаи более общего метода, который сводится к определению коэффициентов C_i в матричном выражении волновой функции в виде столбцов. Действительно, волновую функцию в координатном представлении можно рассматривать точно так же, как волновую функцию в матричном представлении в виде

*) При этом не определяются диагональные элементы A_{ii} . Легко убедиться, что коммутатор $(AH - HA)$ не изменится от прибавления к A матрицы вида $A_{ii} \delta_{ij}$, где A_{ii} — произвольная матрица. Однако мы увидим, что на практике эта степень произвольности не особенно важна (см. примечание на стр. 445).

**) Это доказательство имеется только для дискретного представления. Однако его можно видоизменить таким образом, что оно становится применимым также и в случае непрерывного представления,

столбца. Используя собственные функции оператора координат $\delta(x - x')$, имеем

$$\psi(x) = \int \psi(x') \delta(x - x') dx'.$$

Следовательно, функции ψ можно рассматривать так же, как если бы они были записаны в виде столбца

$$\begin{bmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \psi(x_3) \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix},$$

где значения x_1, x_2 и т. д. могут в пределе стать бесконечно близкими.

Уравнение Шрёдингера можно теперь рассматривать как уравнение для коэффициентов разложения $\psi(x_i)$. Если изменить наше представление, воспользовавшись собственными функциями некоторого другого оператора A , который для удобства принят дискретным, то будем иметь $\psi = \sum_a C_a \psi_a(x)$. Тогда аналогом уравнения Шрёдингера будет уравнение, определяющее временное изменение коэффициентов C_a .

Это уравнение получим из уравнения Шрёдингера в координатном представлении

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi.$$

Выразим теперь ψ в виде ряда по функциям $\psi_a(x)$. Так как ψ является функцией времени, то C_a тоже должны быть функциями времени. Тогда получаем

$$i\hbar \sum_{a'} \dot{C}_{a'} \psi_{a'}(x) = \sum_{a'} C_{a'} H \psi_{a'}(x).$$

Умножим это уравнение почленно на $\psi_a^*(x)$ и проинтегрируем по всем x . Тогда получаем (использовав условие ортонормировки функций ψ_a)

$$i\hbar \dot{C}_a = \sum_{a'} H_{aa'} C_{a'}, \quad (16.42)$$

где

$$H_{aa'} = \int \psi_a^*(x) H \psi_{a'}(x) dx.$$

Это уравнение полностью определяет изменение коэффициентов C_a во всех случаях, когда C_a известно для какого-то одного момента времени.

Задача 14. Показать, что уравнение (16.42) можно получить с помощью унитарного преобразования из уравнения Шрёдингера в координатном представлении, причем матрицей преобразования является функция $\psi_a(x)$ (собственные функции оператора A в x -представлении). Эта функция рассматривается как матрица в переменных a и x , хотя по отношению к одной (a) она дискретна, а по отношению к другой (x) она непрерывна.

20. Гамильтоновское представление*). Особенно полезным является представление, в котором оператор H диагонален, или $H_{ij} = E_i \delta_{ij}$. Матрицей преобразования при переходе от x -представления к гамильтоновскому представлению является $\psi_{E_i}(x)$ — собственные функции оператора H , принадлежащие энергетическим уровням E_i .

В этом представлении уравнение Шрёдингера (16.42) принимает вид

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j = E_i C_i, \quad (16.43)$$

а решение его

$$C_i = e^{-iE_i t/\hbar} C_i^0, \quad (16.44)$$

где C_i^0 является постоянной. Итак, в гамильтоновском представлении коэффициенты C_i колеблются, как в простом гармоническом движении. Пример гамильтоновского представления дан выражением (16.15), где оператор $x + ip/\hbar$ дается в виде матрицы в таком представлении, в котором гамильтониан гармонического осциллятора диагонален.

21. Гейзенберговское представление. Рассмотрим преобразование, при котором мы переходим от C_i к C_i^0 как к основным переменным. Преобразование определяется уравнением (16.44). Легко проверить, что матрица преобразования равна

$$\alpha_{ij} = \delta_{ij} e^{-iE_i t/\hbar}. \quad (16.45a)$$

То, что это преобразование является унитарным, легко доказать вычислением, а именно:

$$(\alpha^+ \alpha)_{ij} = \sum_k (\alpha^+)_{ik} \alpha_{kj} = \sum_k \delta_{ik} \delta_{kj} e^{-i(E_j - E_k)t/\hbar} = \delta_{ij}. \quad (16.45b)$$

Это преобразование приводит к представлению, известному как гейзенберговское, в котором «вектор» волновой функции C_i^0 является постоянным. Однако матричные элементы оператора A в этом представлении равны

$$A_{ij}^0 = \sum_k \alpha_{ik}^+ A_{kl} \alpha_{lj} = e^{-i(E_j - E_i)t/\hbar} A_{ij}. \quad (16.46)$$

*) В нашей литературе принят другой термин — энергетическое представление. — *Прим. ред.*

При помощи уравнения (16.45а) легко проверить, что это равенство эквивалентно следующему:

$$A_{EE'}^0 = \int \psi_E^*(x) e^{iEt/\hbar} A \psi_{E'}(x) e^{-iE't/\hbar} dx. \quad (16.47)$$

Использование гейзенберговского представления эквивалентно разложению волновой функции в ряд по функциям $\psi_E(x) e^{-iEt/\hbar}$:

$$\psi = \sum_E \psi_E(x) e^{-iEt/\hbar} C_E^0. \quad (16.48)$$

Из уравнения (16.46) очевидно, что матричные элементы теперь гармонически колеблются со временем. Однако мы исходили из представления Шрёдингера, в котором большинство операторов, таких, как x , p , H , выражается постоянными матрицами, в то время как волновая функция меняется со временем. Легко видеть, что при вычислении средних значений операторов $\bar{A} = \sum_{i,j} C_i^* A_{ij} C_j$ безразлично,

рассматриваем ли мы C_i колеблющимися по закону $e^{-iE_i t/\hbar}$, в то время как A_{ij} остаются постоянными, или же мы рассматриваем C_i как постоянные, в то время как A_{ij} колеблются по закону $e^{-i(E_j - E_i)t/\hbar}$. Здесь, как и всегда при унитарном преобразовании, мы просто описываем одно и то же явление в разных представлениях.

22. Изменение операторов со временем в гейзенберговском представлении. Очевидно, что волновая функция Шрёдингера C_i в гамильтоновском представлении получена из функции C_i^0 в гейзенберговском представлении путем унитарного преобразования, которое обратное преобразованию (16.45а). Так как унитарное преобразование эквивалентно вращению в «пространстве волновых функций» (см. п. 14), то, следовательно, движение системы эквивалентно некоторому (в общем случае сложному) повороту в этом пространстве*). Это преобразование от представления Шрёдингера к представлению Гейзенберга аналогично переходу от стационарной системы осей к такой системе, которая вращается вместе с векторами волновой функции так, что в этой последней системе волновая функция оказывается постоянной. Операторы, которые были постоянными в покоящейся системе, становятся функциями времени во вращающейся системе.

Используем ли мы представление Шрёдингера или Гейзенберга, это зависит только от того, какое из них удобнее для решения рассматриваемой задачи.

*) В классическом пределе это эквивалентно хорошо известному выводу, что движение можно выразить как серию бесконечно малых канонических преобразований.

Вычислим теперь производную по времени $A_{EE'}$ ($A_{EE'}$ определяется уравнением (16.2)):

$$\frac{dA_{EE'}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (E - E') \int \psi_E^*(x) A \psi_{E'}(x) e^{i(E-E')t/\hbar} dx + \\ + \int \psi_E^*(x) \frac{\partial A}{\partial t} \psi_{E'}(x) e^{i(E-E')t/\hbar} dx. \quad (16.49)$$

Но по определению

$$\frac{dA_{EE'}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (E - E') A_{EE'} + \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_{EE'}, \quad (16.50a)$$

где матричные элементы выражены в гейзенберговском представлении. Если заметить, что матрица оператора Гамильтона равна $H_{EE'} = E \delta_{EE'}$, то легко показать, что уравнение (16.50a) эквивалентно

$$\frac{dA_{EE'}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (HA - AH)_{EE'} + \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_{EE'}. \quad (16.50b)$$

Задача 15. Доказать, что вышеприведенный результат инвариантен по отношению к любому унитарному преобразованию, которое не является функцией времени.

До сих пор мы пользовались гейзенберговским представлением только при условии, что гамильтониан диагонален. Однако можно обобщить гейзенберговское представление, разложив волновую функцию в ряд по какой-либо полной системе функций $\varphi_n(x, t)$, являющихся решениями уравнения Шрёдингера. Наиболее общее решение уравнения Шрёдингера можно разложить в ряды по собственным функциям оператора H . Таким образом,

$$\varphi_n(x, t) = \sum_E \alpha_{En} \psi_E(x) e^{-iEt/\hbar}, \quad (16.51)$$

где α_{En} — постоянные коэффициенты разложения. Если функции $\varphi_n(x, t)$ (как и $\psi_E(x)$) образуют полную ортонормированную систему, то, как показано в п. 14, α_{En} — унитарная матрица, а преобразование от $\psi_E(x) e^{-iEt/\hbar}$ к $\varphi_n(x, t)$ — унитарное преобразование. Действительно, чтобы получить это преобразование в явной форме, умножим выражение (16.51) почленно на $(\alpha^+)_{nE'}$ и просуммируем по n . Используя унитарный характер матрицы $(\alpha^+)_{nE'}$, получаем

$$\sum_n (\alpha^+)_{nE'} \varphi_n(x, t) = \sum_n \sum_E (\alpha^+)_{nE'} \alpha_{En} \psi_E(x) e^{-iEt/\hbar} = \psi_{E'}(x) e^{-iE't/\hbar}.$$

Из задачи 15 тогда следует вывод, что уравнение (16.50b) дает выражение для производной по времени матричного элемента даже в наиболее общем гейзенберговском представлении. (Заметьте аналогию этого уравнения с уравнением (9.37).) Однако надо отметить,

что уравнение (16.506) применимо *только* в гейзенберговском представлении.

В качестве частного случая из уравнения (16.506) можно показать, что основные перестановочные соотношения между операторами p и x являются постоянными движения. Действительно,

$$\frac{d}{dt}(xp - px) = \frac{i}{\hbar} [H(px - xp) - (px - xp)H].$$

Если принять, что в начальный момент $px - xp = \hbar/i$, то

$$\frac{d}{dt}(px - xp) = 0,$$

поскольку $\hbar/i$ коммутирует с любым оператором. Таким образом, доказано, что если вышеприведенное перестановочное соотношение существует при $t=0$, то коммутатор остается все время постоянным. Это является важным подтверждением правильности нашего выбора перестановочных соотношений, потому что в общем случае выбор перестановочных соотношений не обязательно получается с помощью уравнений движения.

Задача 16. Доказать, что из уравнения (16.506) следует уравнение (9.37).

Задача 17. Показать, что из $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ можно получить

$$\frac{d}{dt}(x_{ij}) = \frac{p_{ij}}{m}, \quad \frac{d}{dt}(p_{ij}) = -\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)_{ij}.$$

Из задачи 17 видно, что уравнение (16.506) содержит в себе квантовые уравнения, заменяющие классические уравнения движения.

23. Скобки Пуассона. Уравнение (16.506) иногда называется квантовым уравнением движения для операторов p и x . Оно аналогично классическому уравнению для функции координат и импульсов

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial p} \frac{dp}{dt} + \frac{\partial A}{\partial q} \frac{dq}{dt} + \frac{\partial A}{\partial t} = \left[\frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} \right] + \frac{\partial A}{\partial t}. \quad (16.52)$$

Выражение в прямых скобках называется «скобками Пуассона» для A и H . В общем случае для системы с одной степенью свободы скобки Пуассона для двух функций A и B обозначают (см. [4] или [12])

$$[A, B] = \left[\frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q} \right]. \quad (16.53)$$

Так как $\frac{d}{dt}(\overline{A}) = \frac{i}{\hbar} (\overline{HA - AH}) + \frac{\partial \overline{A}}{\partial t}$, то очевидно, что в классическом пределе коммутатор должен стремиться к соответствующим

скобкам Пуассона, умноженным на $\hbar/i$. В более общем случае можно показать, что это справедливо для всех операторов, т. е.

$$(AB - BA) \rightarrow \frac{\hbar}{i} [A, B] \quad (16.54)$$

в классическом пределе. Действительно, оказывается, что для большинства операторов, с которыми мы сталкиваемся, коммутатор равен произведению $\hbar/i$ на скобки Пуассона, рассматриваемые как оператор.

Задача 18. Доказать, что $(xp - px) = \frac{\hbar}{i} [x, p]$.

Задача 19. Доказать, что $(x^2 p^2 - p^2 x^2) = \frac{\hbar}{i} [x^2, p^2]$. Проверить, что скобки Пуассона предварительно симметризированы относительно порядка сомножителей x и p .

Задача 20. Доказать, что $(Ox - xO) = \frac{\hbar}{i} [O, x]$, где O — произвольный эрмитовский оператор, который можно представить в виде степенного ряда

$$O = \sum_{m, n} C_{m, n} \frac{(x^n p^m + p^m x^n)}{2}.$$

Определение произвольного оператора требует только определения его коммутаторов с полной системой коммутирующих операторов (см. п. 18). Поскольку координата x (в одном измерении) сама по себе является полной системой коммутирующих величин, то из задачи 20 очевидно, что можно получить иной способ формулировки квантовой теории. В этом методе утверждается как постулат, что скобки Пуассона для любого оператора с оператором x равны соответствующему коммутатору, деленному на $\hbar/i$ *). Этой формулировкой часто пользуются**), но в этой книге мы пытаемся развить теорию, исходя из менее абстрактных понятий.

*) По этому определению скобки Пуассона $[A, B]$ не обязательно тождественно равны коммутатору $\frac{i}{\hbar} (AB - BA)$, но они, конечно, всегда равны в классическом пределе (см. задачу 21).

**) Как показано в п. 18, диагональные элементы операторов не могут быть определены таким путем. Однако диагональные элементы можно определить из требования, что среднее значение оператора в координатном представлении должно стремиться к правильной классической величине в классическом пределе. При этом еще остается некоторая неоднозначность в области малых квантовых чисел, но здесь можно руководствоваться эвристическим требованием, что теория должна быть по возможности более простой при подчинении общим требованиям непротиворечивости. Если это выполнено, то получается обычная теория, в которой во всех встречающихся функциях классическая величина p заменяется оператором $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}$. Получающийся оператор делается эрмитовским путем соответствующей симметризации порядков сомножителей (см. гл. 9, п. 13).

Задача 21. Рассмотреть коммутатор из эрмитовских операторов

$$A = \frac{x^n p^m + p^m x^n}{2}, \quad B = \frac{x^r p^s + p^s x^r}{2}.$$

Равны ли тождественно скобки Пуассона $[A, B]$ (симметризированные чтобы сделать их эрмитовскими) $\frac{i}{\hbar} (AB - BA)$?

24. Формулировка квантовой теории по Гейзенбергу. В этой книге матричная формулировка квантовой теории выводилась из волновой теории, что в основном совпадало с развитием теории, начатой работами де Бройля и Шрёдингера. Фактически матричный метод независимо развит Гейзенбергом несколько раньше разработки волновой теории. Эквивалентность этих обоих методов была доказана несколькими годами позже с помощью теории унитарных преобразований (подробнее см. [5]).

25. Физическое истолкование матричного представления и теории преобразования. Рассмотрим теперь физическое истолкование матричного представления и теории преобразования. Это истолкование в качественной форме при обсуждении дополнительности уже появлялось в гл. 8, п. 15.

Отметим сначала, что с любой наблюдаемой величиной (оператором) A связана система собственных функций ψ_a , которая принадлежит соответственно собственным значениям, обозначаемым через a . Если ψ_a — волновая функция, то этот факт истолковывается таким образом, что наблюдаемая величина A имеет определенное значение a . Более того, мы знаем, что в соответствии с постулатом разложения произвольную волновую функцию можно представить в виде разложения в ряд по собственным функциям любой наблюдаемой величины A . Таким образом,

$$\psi = \sum_a C_a \psi_a.$$

Очевидно, что когда в выражение волновой функции входит несколько функций ψ_a , то величину A уже нельзя рассматривать как точно определенную. В этом случае величины $|C_a|^2$ дают вероятность того, что измерение A , произведенное в системе, определяемой волновой функцией ψ , даст определенный результат a . Однако до измерения A существует не в качестве определенной величины, а в виде некоторой потенциальной возможности, которая реализуется в более определенной форме в результате взаимодействия с измерительной аппаратурой (гл. 6, пп. 9 и 13; гл. 8, пп. 14 и 15).

Физическое значение величин C_a не исчерпывается приведенным выше определением $|C_a|^2$, поскольку, как мы увидим, фазовые соотношения между C_a позволяют определить распределение вероятностей для переменных, которые не коммутируют с A . Чтобы показать это,

рассмотрим такую наблюдаемую величину B , которую в более общем виде можно представить в виде матрицы $B_{aa'}$ в A -представлении. Обозначим собственные функции B через φ_b . Тогда в соответствии с п. 14 существует матрица унитарного преобразования β_{ab} , т. е. имеем

$$\varphi_b = \sum_a \beta_{ab} \psi_a.$$

Это означает, что каждая собственная функция оператора B в общем случае будет линейной комбинацией собственных функций оператора A . Поэтому если B имеет определенное значение, то значения A обязательно будут распределены в некоторой области переменных, определяемой областью, в которой коэффициенты β_{ab} заметно отличаются от нуля *). Более того, наблюдаемая величина B может иметь определенное значение b только тогда, когда функции ψ_a согласуются и с амплитудами, и с фазами, определяемыми коэффициентами β_{ab} . Это означает, что фазовые соотношения, с которыми согласуются функции ψ_a , вообще говоря, имеют физический смысл, так как они будут определять, например, имеет ли величина B определенное значение.

Рассмотрим теперь состояние, когда φ_b — волновая функция, так что B имеет в этом состоянии определенное значение, а A не имеет. Предположим далее, что система взаимодействует с прибором, который может быть использован для измерений величины A . Когда это взаимодействие окончено, то (см. гл. 6, п. 3) каждая функция ψ_a умножается на неопределенный фазовый множитель $e^{i\alpha_a}$, так что φ_b определяется выражением

$$\varphi_b = \sum_a \beta_{ab} e^{i\alpha_a} \psi_a.$$

Поэтому фазовые соотношения, необходимые для получения собственного значения B , нарушаются в процессе измерения величины A . (В этом и заключается физический смысл некоммутируемости операторов A и B .)

Перед взаимодействием с измерительной установкой система обладала интерференционными свойствами, связанными с тем, что состоянию соответствовало много значений a , и поэтому, говоря буквально, система как бы одновременно обладала всеми этими значениями. После измерения система уже не имеет определенных фазовых соотношений между функциями ψ_a . Последующее поведение системы можно представить так, что она в это время имеет значение A , причем вероятность того, что это значение равно a , определяется величиной $|\beta_{ab}|^2$ (ср. с гл. 6, п. 4 и гл. 22, п. 9). С другой

*) Легко показать, что если B не коммутирует с A , то в разложении φ_b требуется более чем одна собственная функция ψ_a .

стороны, теперь волновой функции соответствует некоторая область возможных значений оператора B . Таким образом, при указанном выше процессе измерения система испытывает переход из состояния, в котором наблюдаемая величина B имела определенное значение, а A была не полностью определенной величиной (она лишь потенциально способна принять более определенное значение), в состояние, в котором A имеет определенное значение, а B не полностью определена и имеет лишь возможность получить более определенное значение. Итак, для каждой наблюдаемой величины существует два аспекта: она может существовать или в определенной форме, или же в форме не полностью определенной возможности *).

Тот факт, что наблюдаемая величина может частично иметь характер лишь потенциальной возможности, указывает на коренное различие между квантовомеханическим и классическим определениями природы материи. Каждая наблюдаемая величина соответствует некоторому физическому свойству, через которое система может обнаружить себя. По каждой такой наблюдаемой величине можно распределять по категориям (или классифицировать) возможные результаты измерений соответствующего физического свойства, потому что, если измерение данной наблюдаемой величины правильно, то результат измерения должен быть каким-то одним из некоторой совокупности логически возможных различных результатов. Если две наблюдаемые величины не коммутируют, то нельзя применять одновременно оба способа классификации, связанные с соответствующими экспериментами. Таким образом, когда измеряется одна из наблюдаемых величин, полностью аннулируется способ классификации, который связан с другой наблюдаемой величиной, не коммутирующей с измеряемой. Это объясняется, как было показано, тем, что измерение любой одной наблюдаемой величины заставляет систему переходить в состояние, для которого существует некоторая область значений второй наблюдаемой величины, не коммутирующей с первой. Такое поведение системы резко отличается от того, которое предсказывалось классической теорией. С классической точки зрения, каждая частица может обладать физическим состоянием, которое классифицируется значениями ее положения и импульса. Этот способ классификации никогда не меняется, меняются лишь значения величин, связанные с такой классификацией. В квантовой же теории состояния системы могут быть расклассифицированы либо по определенным значениям положения, либо по определенным значениям импульса, но не по обоим вместе. В процессе измерений характер классификации в общем случае совершенно изменяется, и соответствующее математическое преобразование физически отражается

*) Ср. с обсуждением динамических переменных типа момента количества движения в гл. 14, п. 21.

в переходах от поведения системы как частицы (что связано с координатным представлением) к поведению системы как волны (что связано с импульсным представлением). Но в принципе имеется бесконечное количество систем, классификации которых включают и импульс, и положение. Так, можно разложить волновую функцию в ряд по собственным функциям гармонического осциллятора (гл. 13), или по собственным функциям атома водорода (гл. 15), или другими способами, которые еще встретятся. В этих смешанных способах классификации систем будут соответствовать некоторой области возможных значений и координат, и импульсов.

Наконец, мы видим, что понятие о преобразовании различных представлений дает естественное истолкование выражению наблюдаемой величины через матрицы. Если два оператора A и B не коммутируют, так что представления, связанные с ними, нельзя применять одновременно, то наблюдаемая величина B будет одновременно связана со многими значениями A . Это свойство проявляется в представлении наблюдаемой величины B через матричные элементы $B_{aa'}$, симметрично принадлежащие двум значениям a . Только в таком представлении, в котором оператор B диагонален, наблюдаемую величину можно полностью описать с помощью одних элементов B_{bb} , каждый из которых связан только с одним собственным значением b .

Примечание редактора к гл. 16

В связи с высказываниями автора о специфике квантовой механики следует еще раз подчеркнуть, что квантовая теория значительно шире и глубже классической учитывает единство материального мира. Это особенно ярко проявляется в квантовом подходе к проблеме взаимоотношения объекта измерения и прибора в микроявлениях. Кроме того, квантовая механика по сути дела неявно учитывает неисчерпаемость материальных связей и это в первую очередь и проявляется в том, что ее законы носят не только динамический, но и статистический характер.

СПИН И МОМЕНТ КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ

В гл. 14 изучались квантовые свойства момента количества движения систем, состоящих из одной частицы. Мы хотим теперь распространить эту трактовку на случай систем многих частиц. При этом будет также исследован вопрос о добавочном моменте, возникающем из-за того, что электрон обладает собственным спиновым моментом количества движения.

1. Спин электрона. Хотя уравнение Шрёдингера прекрасно согласуется с опытом при предсказании частот спектральных линий, но имеются все же большие расхождения, которые можно объяснить, если допустить, что электрон обладает, кроме обычного орбитального момента, дополнительно еще собственным моментом, который проявляет себя так, как если бы электрон был вращающимся твердым телом [6]. Было найдено, что можно получить согласие с опытом, если допустить, что величина возможной проекции этого дополнительного момента равна $\hbar/2$. Однако соответствующий ему магнитный момент, введение которого необходимо для объяснения эффекта Зеемана, равен $\mu = e\hbar/2mc$, т. е. точно такой же, какой вызывается орбитальным моментом с проекцией $\hbar$ *). Поэтому магнетомеханическое отношение, т. е. отношение магнитного момента к механическому, вдвое больше для спина электрона, чем для орбитального движения.

Было предпринято много попыток связать этот собственный момент с моментом электрона, рассматриваемого как твердое тело. Действительно, требуемое магнетомеханическое отношение как раз равно тому, которое получилось бы, если бы электрон имел вид однородного сферического слоя, вращающегося вокруг определенной оси. Однако систематическое развитие такой теории встретило столь большие трудности, что так и не удалось прийти к определенным

*) Надо заметить, что поскольку величина спина порядка $\hbar$, то спин является специфически квантовомеханическим свойством. В классическом пределе его влияние слишком мало, чтобы его можно было заметить. Поэтому, как уже отмечалось (гл. 9, п. 28), его нельзя получить, потребовав, чтобы квантовая теория стремилась к правильному классическому пределу.

выводам [6]. Несколько позже Дирак [4] вывел релятивистское волновое уравнение для электрона, в котором спин и заряд связаны друг с другом так, что эту связь можно понять только в связи с требованием релятивистской инвариантности. Однако в нерелятивистском пределе электрон ведет себя как частица, которая имеет собственный момент с проекциями, равными $\hbar/2$. Поэтому в этой главе мы рассмотрим нерелятивистскую теорию спина в форме, впервые развитой Паули, и просто допустим существование спина как дополнительное эмпирическое требование, не пытаясь объяснить его происхождение более глубоким путем.

2. Матричное выражение операторов момента количества движения. В этой главе удобно воспользоваться матричным представлением операторов момента количества движения. В соответствии с уравнением (14.35) собственные функции операторов момента количества движения можно определить с помощью двух квантовых чисел l и m , тогда

$$L^2\psi_l^m = \hbar^2 l(l+1)\psi_l^m \quad \text{и} \quad L_z\psi_l^m = \hbar m\psi_l^m.$$

В представлении, в котором L^2 и L_z диагональны, получаем для матричных элементов вышеприведенных операторов

$$L_{l,l'}^2; m, m' = \int \psi_l^{m*} L^2 \psi_{l'}^{m'} d\Omega = \hbar^2 l(l+1) \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (17.1a)$$

$$(L_z)_{l,l'}; m, m' = \int \psi_l^{m*} L_z \psi_{l'}^{m'} d\Omega = \hbar m \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (17.16)$$

Произвольную волновую функцию можно разложить в ряд

$$\psi = \sum_{l,m} a_{lm} \psi_l^m; \quad (17.2)$$

a_{lm} — обобщение выражения волновой функции в виде столбца (см. гл. 16, п. 9), при этом собственные векторы можно рассматривать как прямоугольную таблицу, а не простой столбец. Здесь матричные элементы имеют четыре индекса: $l, l'; m, m'$, как видно из уравнений (17.1a) и (17.16). Нетрудно обобщить матричное умножение и на этот случай.

Остается задача определения матриц для L_x и L_y . Для решения ее удобно воспользоваться выражениями $L_x + iL_y$ и $L_x - iL_y$. В соответствии с уравнениями (14.27) и (14.28) имеем

$$(L_x + iL_y)\psi_l^m = C_l^m \psi_l^{m+1}, \quad (L_x - iL_y)\psi_l^m = C_l'^m \psi_l^{m-1}, \quad (17.3)$$

где C_l^m и $C_l'^m$ — некоторые постоянные, которые будут определены позже. Чтобы найти матричные элементы $(L_x + iL_y)$, воспользуемся

уравнением (16.2):

$$\begin{aligned}(L_x + iL_y)_{l, l'; m, m'} &= \int \psi_l^{m*} (L_x + iL_y) \psi_{l'}^{m'} d\Omega = \\ &= C_{l'}^{m'} \int \psi_l^{m*} \psi_{l'}^{m'+1} d\Omega = C_{l'}^{m'} \delta_{ll'} \delta_{m, m'+1}.\end{aligned}\quad (17.4a)$$

Аналогично

$$(L_x - iL_y)_{l, l'; m, m'} = C_{l'}^{m'} \delta_{ll'} \delta_{m, m'-1}.\quad (17.4б)$$

Это означает, что операторы $(L_x + iL_y)$ и $(L_x - iL_y)$ представляются диагональными по l матрицами, все элементы которых сдвинуты на одно место от диагонали по m .

3. Возможные значения l и m ; полуцелые квантовые числа момента количества движения. Исследуем теперь снова вопрос о том, как определяются возможные значения l и m . Мы увидим, что на основании более общего матричного представления можно получить как целые, так и полуцелые значения для этих величин. В гл. 14 были получены только целые значения, что является результатом определенных строго ограниченных условий, которые фактически осуществляются в случае орбитального момента количества движения, но не имеют места для спина.

Нам нужно определить возможные значения l и m ; пусть ψ_l^m — волновая функция, тогда можно всегда получить волновые функции ψ_l^{m+1} или ψ_l^{m-1} , действуя соответственно (см. уравнения (17.3)) операторами $(L_x + iL_y)$ и $(L_x - iL_y)$. Хотя этот процесс в конце концов приводит к $(L_x + iL_y)\psi_l^{m_1} = 0$ и $(L_x - iL_y)\psi_l^{m_2} = 0$, можно получить произвольно большие значения $|m|$. Но, согласно уравнению (14.30), $\hbar^2 |m|^2 \leq L^2$. Поэтому ясно, что должны существовать значения: максимальное $L_z = m_1 \hbar$ и минимальное $L_z = m_2 \hbar$. Поскольку при переходе от m_1 к m_2 мы меняем значение m только на целые числа, разность $m_1 - m_2$ должна быть также целым числом. Но в уравнениях (14.33) и (14.34) было показано, что $m_2 = -m_1$. Таким образом, ясно, что $m_1 - m_2 = 2m_1$ — целое число, а $m_1 = l$ может быть или целым, или полуцелым. В гл. 14 были выбраны только целые значения l , но когда дело доходит до общего определения оператора через его коммутаторы, то возможны также и полуцелые квантовые числа для момента количества движения.

Учтя этот результат, проверим теперь заново требование, использовавшееся в гл. 14, согласно которому волновая функция должна быть однозначной функцией точки. Все, что можно реально потребовать, сводится к однозначности всех физических наблюдаемых величин. Это достигается, когда средние значения произвольной наблюдаемой величины $\bar{A} = \int \psi^* A \psi d\Omega$ являются однозначными функциями. Последнее требование, несомненно, удовлетворяется выбором

только целых значений l . Однако его можно также удовлетворить и выбором только полуцелых значений, потому что тогда произвольную волновую функцию можно разложить в ряд

$$\psi = \sum_m C_m e^{i(m + \frac{1}{2})\varphi}.$$

Если φ меняется на 2π , то ψ умножается на -1 , но $\psi^* A \psi$ остается при этом неизменным. Однако, если одновременно присутствуют и целые и полуцелые моменты, тогда даже вероятности не будут однозначными. Так, при

$$\psi = C_1 e^{i\varphi/2} + C_2 e^{i\varphi}$$

получаем

$$\psi^* \psi = |C_1|^2 + |C_2|^2 + C_1^* C_2 e^{i\varphi/2} + C_2^* C_1 e^{-i\varphi/2}.$$

Когда φ меняется на 2π , это выражение принимает вид

$$\psi^* \psi = |C_1|^2 + |C_2|^2 - (C_1^* C_2 e^{i\varphi/2} + C_2^* C_1 e^{-i\varphi/2}).$$

Следовательно, разумную теорию орбитального момента можно построить, только когда все моменты будут либо целыми, либо полуцелыми, но только не теми и другими одновременно. Опыт показывает, что фактически существуют лишь целые орбитальные моменты. Например, если выбрать полуцелые l , то это приведет к водородному спектру, сильно отличающемуся от наблюдаемого. Однако при квантовании собственного момента электрона нет причин для априорного выбора целых или полуцелых спинов, и оказывается, что для согласия с опытом надо воспользоваться полуцелыми значениями спина.

4. Матрицы для операторов $(L_x + iL_y)$ и $(L_x - iL_y)$. Вычислим теперь постоянные в уравнениях (17.4). Так как L_x и L_y — эрмитовские операторы, то $(L_x + iL_y)$ и $(L_x - iL_y)$ являются эрмитовскими сопряженными операторами. Используя это, запишем уравнение (14.31) в матричном представлении, а именно *):

$$[(L_x - iL_y)(L_x + iL_y)]_{mm'} + \hbar^2 m(m+1)\delta_{mm'} = \hbar^2 l(l+1)\delta_{mm'}. \quad (17.5)$$

Далее,

$$\begin{aligned} [(L_x - iL_y)(L_x + iL_y)]_{mm'} &= \sum_n (L_x - iL_y)_{mn} (L_x + iL_y)_{nm'} = \\ &= \sum_n C^{m*} \delta_{m+1, n} C^{m'} \delta_{n, m'+1} = C^{m*} C^{m'} \delta_{mm'}. \end{aligned}$$

*) Поскольку все имеющие смысл операторы (т. е. L_x , L_y , L_z , L^2) диагональны по l , индекс l опускается везде, кроме тех случаев, когда мы имеем дело с матрицами, не диагональными по l .

Для случая $m = m'$ имеем

$$\left. \begin{aligned} (C^m)^\dagger C^m &= \hbar^2 [l(l+1) - m(m+1)] = \hbar^2 (l-m)(l+m+1), \\ |C^m| &= \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)}. \end{aligned} \right\} \quad (17.6)$$

Заметим, что фазы C^m при этом остались неопределенными, поскольку любой их выбор удовлетворяет правилам коммутации. Это означает

$$(L_x + iL_y)_{mm'} = \hbar \sqrt{(l-m')(l+m'+1)} \delta_{m, m'+1} e^{i\varphi_m}, \quad (17.7)$$

где φ_m — произвольное вещественное число.

Так как $(L_x - iL_y)$ — величина, эрмитовски сопряженная $(L_x + iL_y)$, то имеем

$$(L_x - iL_y)_{mm'} = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \delta_{m+1, m'} e^{-i\varphi_m}. \quad (17.8)$$

Покажем теперь, что подбором постоянного фазового множителя при определении волновых функций можно исключить фазовый множитель из матричных элементов. Для этого обратимся к случаю единственных не исчезающих матричных элементов $(L_x + iL_y)$, а именно:

$$(L_x + iL_y)_{m, m-1} = \int \psi_m^* (L_x + iL_y) \psi_{m-1} d\Omega. \quad (17.9)$$

Задача 1. Доказать с помощью уравнения (17.9), что при умножении волновой функции ψ_m на фазовый множитель $\exp\left(-i \sum_{n=l}^{n=m} \varphi_n\right)$ матричные элементы умножаются на $e^{-i\varphi_m}$, так что фазовые множители в уравнении (17.7) выпадают. Подтвердить также, что матричные элементы $(L_z)_{mm'}$ и $L_{mm'}^2$ при этом преобразовании не изменяются.

Из этой задачи видно, что матричные элементы, полученные умножением ψ_m на подходящий постоянный фазовый множитель, дают такое же представление, как и при старой системе функций. Поэтому всегда можно допустить, что мы пришли к такому представлению, выбрав все фазовые множители равными единице. Тогда получаем

$$(L_x + iL_y)_{mm'} = \hbar \sqrt{(l-m')(l+m'+1)} \delta_{m, m'+1}, \quad (17.10)$$

$$(L_x - iL_y)_{mm'} = (L_x + iL_y)_{mm'}^\dagger = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \delta_{m', m+1}. \quad (17.11)$$

В качестве примера выпишем матричные элементы для случая $l = 1/2$:

$$(L_x + iL_y) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (L_x - iL_y) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad (17.12)$$

$$L_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad L_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad L_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (17.13)$$

где ряды и столбцы соответствуют $m' = \pm 1/2$ и $m = \pm 1/2$.

Задача 2. Найти L_x, L_y, L_z для случая $l=1$ и показать с помощью уравнений (14.15) и (14.61), что тот же результат получается для сферических гармоник в случае $l=1$.

Матрицы момента количества движения для спина $\hbar/2$ были впервые найдены Паули. Эти три матрицы, называемые *матрицами Паули*, имеют вид

$$L_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad L_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \quad L_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \quad (17.14)$$

где σ — матрицы, определяемые уравнением (17.13).

Поскольку σ -матрицы пропорциональны операторам момента количества движения, то они удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_z \quad (17.15)$$

и другим соотношениям, получаемым циклической перестановкой x, y, z . Эти три перестановочных соотношения содержатся также в векторном уравнении $[\sigma\sigma] = 2i\sigma$.

Легко показать непосредственным вычислением, что

$$\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0. \quad (17.16)$$

Отсюда и из (17.15) получаем

$$\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z \quad (17.17)$$

или в более общем виде

$$[\sigma\sigma] = 2i\sigma. \quad (17.18)$$

Прямым вычислением можно показать, что $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$ или

$$\sigma^2 = 3 \quad (17.19)$$

и

$$L^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3}{4} \hbar^2. \quad (17.20)$$

Это согласуется с выводами, полученными из уравнения (17.1a) с $l = \frac{1}{2}$.

5. Собственные функции операторов σ . Волновую функцию можно выразить в виде матрицы-столбца $\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$, как в гл. 16, п. 9, где $|C_1|^2$ дает вероятность того, что $L_z = \hbar/2$, а $|C_2|^2$ дает вероятность того, что $L_z = -\hbar/2$. Для нормировки волновой функции необходимо потребовать, чтобы

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1. \quad (17.21)$$

Если волновая функция является функцией от x , то распределение направлений спина может зависеть от положения. Поэтому в наиболее общем случае C_1 и C_2 будут различными функциями от x и волновую функцию можно записать в виде матрицы-столбца $\begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}$, где

$$\int_{-\infty}^{\infty} (|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2) dx = 1. \quad (17.22)$$

Это означает, что существование спина приводит к использованию двух волновых функций вместо одной*). Если спин не зависит от положения, то обе функции $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ будут зависеть от x одинаково, так что волновую функцию можно представить в виде такого произведения:

$$\psi(x) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \psi(x) \psi_S. \quad (17.23)$$

Нормированные волновые функции, соответствующие $L_z = \hbar/2 (S = +)$ и $L_z = -\hbar/2 (S = -)$, имеют вид

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (17.24)$$

Для проверки ортогональности двух волновых функций $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$ нужно вычислить произведение

$$(a_1^* a_2^*) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = a_1^* b_1 + a_2^* b_2.$$

Очевидно, что ψ_1 и ψ_2 ортогональны.

6. Собственные функции σ_x и σ_y . Для определения собственных функций оператора σ_x потребуем, чтобы $\sigma_x \psi = \alpha \psi$, где α — собственное значение, или

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}.$$

Это уравнение сводится к

$$C_2 = \alpha C_1,$$

$$C_1 = \alpha C_2,$$

$$\alpha^2 = 1, \quad \text{или} \quad \alpha = \pm 1.$$

*) Отчасти напоминает появление нескольких компонентов потенциала при описании электромагнитных волн.

Таким образом, как и следовало ожидать, возможные значения σ_x равны ± 1 . Соответствующие нормированные волновые функции равны

$$(\psi_+)_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad (\psi_-)_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (17.25)$$

Подобным же путем можно определить и собственные значения σ_y из уравнения

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix};$$

$$\begin{aligned} -iC_2 &= \alpha C_1, \\ iC_1 &= \alpha C_2, \\ \alpha^2 &= 1, \quad \alpha = \pm 1. \end{aligned}$$

Нормированные волновые функции равны

$$(\psi_+)_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad (\psi_-)_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}. \quad (17.26)$$

Задача 3. Доказать, что $(\psi_+)_y$ и $(\psi_-)_y$ ортогональны.

Как и в случае целочисленных моментов количества движения (см. гл. 14, пп. 12 и 18), система может обладать определенным моментом в направлении осей x или y только в результате интерференции состояний с $\sigma_z = +1$ и $\sigma_z = -1$. Это означает, что когда момент в любом одном направлении определен, то системе одновременно принадлежат все возможные значения двух других составляющих момента. В связи с этим заметим, что хотя $(L_z)^2 = \hbar^2/4$, но $L^2 = 3\hbar^2/4$. Это означает, что даже когда z -составляющая спина точно определена, две другие составляющие не равны нулю, а флуктуируют между значениями $\hbar/2$ и $-\hbar/2$.

7. Преобразования спиноров. Если надо определить среднее значение спина в произвольном направлении, то лучше всего воспользоваться векторным характером момента количества движения и записать

$$\sigma_n = \sigma_x \cos \alpha + \sigma_y \cos \beta + \sigma_z \cos \gamma, \quad (17.27)$$

где α , β и γ — соответственно углы между этим направлением и осями x , y , z .

Матрица σ_n имеет вид

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} \cos \gamma & \cos \alpha - i \cos \beta \\ \cos \alpha + i \cos \beta & -\cos \gamma \end{pmatrix}. \quad (17.28)$$

Решим уравнение для определения собственных значений функции σ_n . В результате получаем

$$C_1 \cos \gamma + C_2 (\cos \alpha - i \cos \beta) = SC_1,$$

$$C_1 (\cos \alpha + i \cos \beta) - C_2 \cos \gamma = SC_2,$$

где S — собственное значение σ_n . Условие разрешимости этой системы дает

$$(S - \cos \gamma)(S + \cos \gamma) = \cos^2 \alpha + \cos^2 \beta = 1 - \cos^2 \gamma;$$

$$S^2 = 1, \quad S = \pm 1.$$

Мы видим, таким образом, что возможные собственные значения составляющих спина в произвольном направлении всегда равны ± 1 . Собственные функции равны

$$\begin{aligned} \psi'_+ &= \frac{1}{\sqrt{\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma + 1 + 2 \cos \gamma}} \begin{pmatrix} 1 + \cos \gamma \\ \cos \alpha + i \cos \beta \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \cos \gamma} \\ \frac{\cos \alpha + i \cos \beta}{\sqrt{1 + \cos \gamma}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\gamma}{2} \\ \frac{\cos \alpha + i \cos \beta}{2 \cos \frac{\gamma}{2}} \end{pmatrix}; \end{aligned} \quad (17.29a)$$

$$\psi'_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{1 - \cos \gamma} \\ \frac{\cos \alpha + i \cos \beta}{\sqrt{1 - \cos \gamma}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\gamma}{2} \\ \frac{\cos \alpha + i \cos \beta}{2 \sin \frac{\gamma}{2}} \end{pmatrix}. \quad (17.29b)$$

Задача 4. Доказать, что ψ'_+ и ψ'_- нормированы и ортогональны.

Ясно, что, выбирая любое направление за ось z , аналогичным образом можно применить спиновую теорию. Когда есть ряд эквивалентных способов для формулировки теории, то мы знаем (гл. 16, п. 15), что эти различные формулировки должны быть связаны унитарными преобразованиями. При получении унитарных преобразований, связывающих ψ'_+ , ψ'_- с ψ_+ , ψ_- , заметим, что справедливы следующие равенства:

$$\left. \begin{aligned} \psi'_+ &= \cos \frac{\gamma}{2} \psi_+ + \frac{(\cos \alpha + i \cos \beta)}{2 \cos \frac{\gamma}{2}} \psi_-, \\ \psi'_- &= -\sin \frac{\gamma}{2} \psi_+ + \frac{(\cos \alpha + i \cos \beta)}{2 \sin \frac{\gamma}{2}} \psi_-. \end{aligned} \right\} \quad (17.30)$$

Преобразование можно записать в виде $\psi'_i = \sum_j \alpha_{ij} \psi_j$. Для доказательства того, что α_{ij} — унитарная матрица, нужно показать, что $\sum_k \alpha_{ik} \alpha_{kj}^* = \delta_{ij}$.

Задача 5. Доказать, что унитарный характер α_{ij} вытекает из того, что пары функций (ψ'_+, ψ'_-) и (ψ_+, ψ_-) нормированы и соответственно ортогональны.

Так как вышеприведенное преобразование поворачивает ось z на определенный угол, то оно эквивалентно повороту на угол γ около некоторой оси в плоскости xu . Выбрав, например, $\cos \beta = 0$ и $\cos \alpha = \sin \gamma$, получим вращение вокруг оси u . Легко показать, что соответствующая матрица равна

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\gamma}{2} & \sin \frac{\gamma}{2} \\ -\sin \frac{\gamma}{2} & \cos \frac{\gamma}{2} \end{pmatrix} \quad (17.31a)$$

и преобразование принимает вид

$$\left. \begin{aligned} \psi'_+ &= \cos \frac{\gamma}{2} \psi_+ + \sin \frac{\gamma}{2} \psi_-, \\ \psi'_- &= -\sin \frac{\gamma}{2} \psi_+ + \cos \frac{\gamma}{2} \psi_- \end{aligned} \right\} \quad (17.31b)$$

Мы замечаем, что это преобразование напоминает вращение вектора (см. уравнения (16.6)), но только в формулы входит *половина* угла вращения. К этому вопросу мы вернемся позже.

Распространим теперь наши рассуждения на вращение вокруг оси z . Заметим в связи с этим, что должно быть возможным определение среднего значения спина в заданном направлении с использованием преобразованных операторов σ'_x и преобразованных волновых функций $\begin{pmatrix} C'_1 \\ C'_2 \end{pmatrix}$. Например, предположим, что мы исходим из заданной системы координат, и вычислим

$$\bar{\sigma}_x = (C_1^* C_2^*) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = C_1^* C_2 + C_2^* C_1. \quad (17.32)$$

Повернем теперь координатную систему вокруг оси z на угол φ .

Предположим, что волновая функция при этом примет вид $\begin{pmatrix} C'_1 \\ C'_2 \end{pmatrix}$, в то время как оператор σ_x можно выразить следующим образом:

$$\sigma_x = \sigma'_x \cos \varphi + \sigma'_y \sin \varphi = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (17.33)$$

Тогда среднее значение σ_x будет равно

$$\bar{\sigma}_x = (C_1'^* C_2'^*) \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C'_1 \\ C'_2 \end{pmatrix} = e^{-i\varphi} C_1'^* C_2' + e^{i\varphi} C_2'^* C_1'. \quad (17.34)$$

Возможно путем унитарного преобразования выразить величины C'_1 и C'_2 через C_1 и C_2 (гл. 16, п. 15). Это унитарное преобразование должно обладать следующим свойством: среднее значение преобразованного оператора можно определить с помощью преобразованных волновых функций таким же путем, как определялось среднее значение первоначального оператора с помощью первоначальных волновых функций. Таким образом, при произвольных C_1 и C_2 мы хотим получить

$$\bar{\sigma}_x = C_1^* C_2 + C_2^* C_1 = e^{-i\varphi} C_1'^* C_2' + e^{i\varphi} C_2'^* C_1'. \quad (17.35)$$

Из исследования выражения (17.35) очевидно, что для этого требуется

$$C_1' = e^{-i\varphi/2} C_1 \quad \text{и} \quad C_2' = e^{i\varphi/2} C_2. \quad (17.36)$$

Читатель может легко проверить, что вышеприведенные соотношения являются частным случаем унитарного преобразования. В матричном представлении уравнение (17.36) может быть записано так:

$$\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1' \\ C_2' \end{pmatrix}. \quad (17.37)$$

Наиболее общее вращение можно составить из последовательных поворотов около осей x , y и z . Поэтому проведенные выше рассуждения легко обобщаются на случай унитарного преобразования, соответствующего произвольному повороту.

Заметим, что в уравнениях (17.37) и (17.31a) в матричные элементы входит *половинный* угол вращения. Эти уравнения следует сравнивать с уравнениями (16.6), где приведены матрицы, определяющие поворот вектора вокруг оси z . В уравнениях (16.6) в матричные элементы входят *полные* углы поворота. Другими словами, комплексные вектор-столбцы $\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$, испытавшие преобразование поворота, похожи в смысле этого преобразования на векторы, с тем лишь отличием, что в него входят половинные углы поворота. Поэтому вектор-столбцы $\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$ представляют собой новый тип величин, аналогичных векторам, но не совпадающих с ними. Их часто называют «спинорами» или «полувекторами». Можно показать [41], что спиноры представляют собой наиболее общее представление группы вращения, поскольку из них можно образовать все обычные векторы и тензоры, а также новые представления, которые отсутствуют в обычной теории векторов и тензоров. Кроме того, спиноры тесно связаны с кватернионами, а также с параметрами Кэйли — Клейна (см. [42], гл. 1; [43], гл. 4).

8. Сложение моментов количества движения. Исследуем теперь вопрос о сложении моментов количества движения в квантовой теории. Например, может понадобиться знание суммарного момента системы, состоящей из двух частиц, или узнать, как складываются спиновый и орбитальный моменты.

При решении этой задачи заметим сначала, что орбитальный момент коммутирует со спиновым. Это может быть тогда, когда эти два типа операторов не действуют друг на друга. Суммарный момент, даваемый спином и орбитальным движением, равен

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \quad (17.38)$$

Квадрат полного момента равен при этом

$$J^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = L^2 + S^2 + 2\mathbf{L}\mathbf{S} = l(l+1)\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + 2\mathbf{L}\mathbf{S}. \quad (17.39)$$

Если в системе имеется больше чем одна частица, то операторы, принадлежащие различным частицам, также коммутируют. Суммарный орбитальный момент равен

$$\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{L}_i, \quad L^2 = \left(\sum_i \mathbf{L}_i \right)^2. \quad (17.40)$$

Суммарный спин равен

$$\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{S}_i, \quad S^2 = \left(\sum_i \mathbf{S}_i \right)^2. \quad (17.41)$$

Полный суммарный момент равен

$$\mathbf{J} = \sum_i \mathbf{L}_i + \sum_i \mathbf{S}_i = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (17.42)$$

$$J^2 = \left(\sum_i \mathbf{L}_i + \sum_i \mathbf{S}_i \right)^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2. \quad (17.43)$$

Легко проверить, что поскольку $\mathbf{L}_i$ и $\mathbf{S}_i$ коммутируют, то все соответствующие компоненты $\mathbf{L}$, $\mathbf{S}$ и $\mathbf{J}$ подчинены тем же правилам коммутации, как и компоненты орбитального момента одной частицы.

Задача 6. Доказать это утверждение.

Из п. 3. очевидно, что собственные значения L^2 , J^2 и S^2 соответственно равны

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad J^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad S^2 = \hbar^2 S(S+1), \quad (17.44)$$

где l , j и S или полуцелые, или целые числа.

Нам часто придется сталкиваться с задачей одновременного определения собственных значений и собственных функций системы,

имеющей моменты количества движения двух различных типов. Например, пусть имеется система двух частиц с орбитальными моментами, соответственно равными l_1 и l_2 , и нужно определить собственные значения и собственные функции суммарного момента. Старая квантовая теория давала правило для такого определения, которое

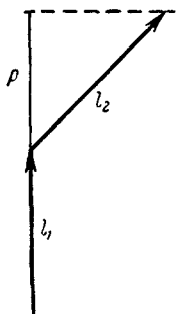


Рис. 75.

позже было строго обосновано. Это хорошо известное правило сложения векторов (см. [13], а также [11], стр. 341 и 356). В этом случае рассматриваются два вектора соответственно с длинами l_1 и l_2 . Предположим, например, что $l_1 \geq l_2$, а также что l_2 может иметь только целочисленные проекции на направление l_1 , как показано на рис. 75. Пусть такая проекция равна p . При этом возможные значения суммарного момента l равны $l_1 + p$, где p меняется от $-l_2$ до $+l_2$. Если $l_2 > l_1$, то следует спроектировать l_1 на l_2 , и тогда видно, что значение l заключено между $l_2 + l_1$ и $l_2 - l_1$. Если проектируемый момент полуцелый, то применяются те же правила, с тем лишь исключением, что значения

проекций теперь заключены между полуцелыми числами. Общее доказательство этого правила будет рассмотрено ниже, сначала проиллюстрируем его на некоторых частных случаях.

9. Сложение спинов двух различных частиц. Рассмотрим для примера две частицы, каждая из которых имеет спин, равный $\hbar/2$. Соответствующий суммарный момент количества движения равен

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{S} &= \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2, \\ S^2 &= (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 = \frac{3}{2}\hbar^2 + 2\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2. \end{aligned} \right\} \quad (17.45)$$

Чтобы получить волновые функции этой системы, необходимо, как указано в гл. 10, п. 11, взять произведения спинных волновых функций отдельных частиц. Таким образом, исходя из векторов в матричном представлении $\psi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, которые соответствуют волновым функциям одной частицы, можно построить четыре независимые волновые функции для системы двух частиц:

$$\left. \begin{aligned} \psi_a &= \psi_+(1)\psi_+(2); & \psi_c &= \psi_-(1)\psi_+(2); \\ \psi_b &= \psi_+(1)\psi_-(2); & \psi_d &= \psi_-(1)\psi_-(2). \end{aligned} \right\} \quad (17.46)$$

Функция $\psi_+(1)\psi_-(2)$, например, означает, что частица с номером 1 имеет спин $+\hbar/2$, в то время как частица с номером 2 имеет спин $-\hbar/2$.

Так как вышеприведенные функции являются наиболее общими, которые можно построить из функций спина двух частиц, то, сле-

довательно, в соответствии с постулатом разложения произвольная функция может быть разложена в ряд по этим четырем функциям:

$$\psi = C_1\psi_a + C_2\psi_b + C_3\psi_c + C_4\psi_d. \quad (17.47)$$

Волновую функцию можно также представить в виде вектора из двойных матриц-столбцов, где первый столбец соответствует спин-овому квантовому числу первой частицы, а второй столбец — спин-овому квантовому числу второй частицы. Таким образом, получаем

$$\psi_a = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \psi_b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \psi_c = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \psi_d = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (17.48)$$

Чтобы нормировать волновую функцию, просуммируем отдельно по спиновым квантовым числам каждой частицы и перемножим полученные результаты. Следовательно, чтобы нормировать ψ_a , рассмотрим выражение $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, где верхняя вектор-строка действует на первый вектор-столбец, а нижняя — на второй. Из этого определения ясно, что $\psi_a, \psi_b, \psi_c, \psi_d$ уже нормированы. Ортогональность определяется обычным путем. Таким образом, для проверки ортогональности ψ_a и ψ_b рассмотрим

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Суммирование по спине второй частицы выделяет нулевой множитель, что и указывает на ортогональность ψ_a и ψ_b . Аналогично можно показать, что все четыре функции ψ ортогональны.

Задача 7. Доказать, что условием нормировки произвольной волновой функции (17.47) является

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 + |C_3|^2 + |C_4|^2 = 1. \quad (17.49)$$

При действии на волновые функции, определенные выражениями (17.46) и (17.48), заметим, например, что σ_{1z} действует только на левый сомножитель произведения $\psi_+(1)\psi_+(2)$, а σ_{2z} — только на правый сомножитель. Тогда, используя выражение $S_z = \frac{\hbar}{2}(\sigma_{1z} + \sigma_{2z})$, получим

$$\left. \begin{aligned} S_z\psi_a &= \hbar\psi_a, \\ S_z\psi_b &= S_z\psi_c = 0, \\ S_z\psi_d &= -\hbar\psi_d. \end{aligned} \right\} \quad (17.50)$$

Это означает, что ψ уже являются собственными функциями S_z и что ψ_a соответствует z -компоненте суммарного момента количества

движения $\hbar$, ψ_d соответствует $-\hbar$, а ψ_b и ψ_c соответствуют нулевому собственному значению S_z .

Построим теперь собственные функции, принадлежащие одновременно операторам S^2 и S_z . Заметим, используя уравнения (17.45), что это эквивалентно получению собственных функций, принадлежащих одновременно операторам S_x и

$$\sigma_1 \sigma_2 = \sigma_{1x} \sigma_{2x} + \sigma_{1y} \sigma_{2y} + \sigma_{1z} \sigma_{2z}.$$

Оператор $\sigma_{1x} \sigma_{2x}$, например, означает, что σ_{1x} действует на левый сомножитель произведения в выражениях (17.48), а σ_{2x} — на правый сомножитель. Действие оператора σ_{2x} происходит раньше действия оператора σ_{1x} , но так как эти два оператора коммутируют, то порядок их действия несуществен.

Легко проверить, что

$$\left. \begin{aligned} (\sigma_1 \sigma_2) \psi_a &= \psi_a, & (\sigma_1 \sigma_2) \psi_d &= \psi_d, \\ (\sigma_1 \sigma_2) \psi_b &= -\psi_b + 2\psi_c, & (\sigma_1 \sigma_2) \psi_c &= -\psi_c + 2\psi_b. \end{aligned} \right\} \quad (17.51)$$

Задача 8. Доказать справедливость выражений (17.51).

Формулы (17.51) показывают, что ψ_a и ψ_d уже являются собственными функциями оператора $\sigma_1 \sigma_2$ с собственными значениями $\sigma_1 \sigma_2 = 1$, но ψ_b и ψ_c таковыми не являются. Поэтому мы ищем волновую функцию в виде $\psi = b\psi_b + c\psi_c$, которая является собственной функцией $\sigma_1 \sigma_2$. Ее можно получить из решения уравнения

$$(\sigma_1 \sigma_2)(b\psi_b + c\psi_c) = \lambda(b\psi_b + c\psi_c), \quad (17.52)$$

где λ — собственное значение оператора $\sigma_1 \sigma_2$.

Используя уравнения (17.51), получаем

$$\psi_b(-b + 2c) + \psi_c(-c + 2b) = \lambda(b\psi_b + c\psi_c). \quad (17.53)$$

Умножив это уравнение на ψ_b^* , суммируя по индексам спинов отдельных частиц и используя ортогональность функций ψ_b и ψ_c , получим

$$\left. \begin{aligned} b(\lambda + 1) &= 2c, & c(\lambda + 1) &= 2b, \\ (\lambda + 1)^2 &= 4, & \lambda &= -1 \pm 2. \end{aligned} \right\} \quad (17.54)$$

Поэтому собственные значения λ в этом случае равны 1 и -3 . Соответствующие нормированные собственные функции имеют вид

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_b + \psi_c) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_+(1)\psi_-(2) + \psi_-(1)\psi_+(2)], \\ \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_b - \psi_c) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_+(1)\psi_-(2) - \psi_-(1)\psi_+(2)]. \end{aligned} \right\} \quad (17.55)$$

Все три функции ψ_a, ψ_1, ψ_d соответствуют собственному значению $\sigma_1\sigma_2 = 1$, или по уравнениям (17.45) $S^2 = 2\hbar^2$. Но это как раз то, что необходимо для момента количества движения $\hbar$. Следовательно, эти три функции соответствуют полному спину $\hbar$ и трем возможным компонентам в направлении z . Функция ψ_2 соответствует собственному значению $\sigma_1\sigma_2 = -3$ или $S^2 = 0$. Это как раз случай нулевого момента. Очевидно, что моменты, которые можно получить для двух частиц со спином, равным $1/2$, как раз те, которые предсказываются правилом сложения векторов в п. 7. По векторной модели $S = \hbar$ соответствует параллельным спинам, а $S = 0$ — антипараллельным спинам. Три состояния с параллельными спинами иногда называются «триплетным» состоянием, в то время как единственное состояние с антипараллельными спинами называют «синглетным» состоянием.

10. Распределение вероятности состояний спина в статистическом ансамбле. Очень часто электроны или другие частицы обладают беспорядочным статистическим распределением направлений спина. Так, если электрон вырывается из металла, то равновероятно, что он обладает положительным или отрицательным значением проекции спина в каком-то направлении. Часто требуется определить вероятность заданного значения суммарного спина двух таких частиц, когда спин каждой из них ориентирован случайно. Такой вопрос может встать, например, при исследовании рассеяния одного электрона другим, причем оба электрона получаются из независимых источников, т. е. между направлениями их спинов корреляция отсутствует.

Покажем теперь, что при этих условиях система двух электронов с равной вероятностью может иметь состояния, соответствующие волновым функциям ψ_a, ψ_d, ψ_1 или ψ_2 , т. е. каждое из трех триплетных состояний возникает с равной вероятностью и каждое из них равновероятно синглетному состоянию. Это означает, что поскольку триплетных состояний втрое больше, чем синглетных, то спины двух электронов окажутся параллельными в $3/4$ всех случаев и антипараллельными только в $1/4$ всех случаев.

При рассмотрении этого вопроса заметим, что правильные одночастичные волновые функции, описывающие состояние, в котором равновероятны положительные и отрицательные значения σ_z , имеют вид

$$\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i\alpha_{1,1}}\psi_+(1) + e^{i\alpha_{1,2}}\psi_-(1)] \quad (17.56a)$$

для первой частицы и

$$\varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i\alpha_{2,1}}\psi_+(2) + e^{i\alpha_{2,2}}\psi_-(2)] \quad (17.56b)$$

для второй частицы, где $\alpha_{1,1}, \alpha_{1,2}, \alpha_{2,1}$ и $\alpha_{2,2}$ являются случайными неопределенными фазовыми множителями (см. гл. 6, п. 4). Суммарная

волновая функция системы двух частиц равна

$$\psi = \varphi_1 \varphi_2 = \frac{1}{2} [e^{i(\alpha_{1,1} + \alpha_{2,1})} \psi_a + e^{i(\alpha_{1,2} + \alpha_{2,2})} \psi_d + \\ + e^{i(\alpha_{1,1} + \alpha_{2,2})} \psi_b + e^{i(\alpha_{1,2} + \alpha_{2,1})} \psi_c], \quad (17.57)$$

или

$$\psi = \frac{1}{2} \left[e^{i(\alpha_{1,1} + \alpha_{2,1})} \psi_a + e^{i(\alpha_{1,2} + \alpha_{2,2})} \psi_d + \frac{(e^{i(\alpha_{1,1} + \alpha_{2,2})} + e^{i(\alpha_{1,2} + \alpha_{2,1})})}{\sqrt{2}} \psi_1 + \right. \\ \left. + \frac{(e^{i(\alpha_{1,1} + \alpha_{2,2})} - e^{i(\alpha_{1,2} + \alpha_{2,1})})}{\sqrt{2}} \psi_2 \right].$$

Тогда функция вероятности $\psi^* \psi$ будет иметь вид

$$\psi^* \psi = \frac{1}{4} (\psi_a^* \psi_a + \psi_d^* \psi_d + \psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 + \text{члены, включающие случайные фазовые факторы}). \quad (17.58)$$

Все члены, включающие случайные фазовые факторы, в среднем будут уничтожаться. Следовательно, в серии из многих опытов четыре состояния: ψ_a , ψ_d , ψ_1 и ψ_2 — будут появляться с равной частотой.

11. Сложение орбитального и спинового моментов частицы. Следующая задача, которую мы рассмотрим, будет касаться вопроса о сложении орбитального и спинового моментов данной частицы. Если имеется частица с заданными L^2 , L_z и σ_z то волновая функция принимает вид

$$\psi = Y_l^m(\vartheta, \varphi) \psi_s, \quad (17.59)$$

где ψ_s — одна из двух спиновых функций, определяемых выражениями (17.24). Очевидно, что

$$J_z \psi = (L_z + S_z) \psi = \left(m + \frac{\sigma_z}{2}\right) \hbar \psi = k \hbar \psi. \quad (17.60)$$

Следовательно, J_z в этом представлении диагонально. Поэтому представляем вышеприведенную волновую функцию в виде

$$\psi_{l,s}^k = Y_l^m(\vartheta, \varphi) \psi_s, \quad \text{где } k = m + S. \quad (17.61)$$

Чтобы J^2 было также диагонально, должно выполняться

$$J^2 \psi_{l,s} = \left(L + \frac{\hbar \sigma}{2}\right)^2 \psi_{l,s} = \hbar^2 \left[l(l+1) + \frac{3}{4} + \frac{L\sigma}{\hbar}\right] \psi_{l,s} = \gamma \hbar^2 \psi_{l,s}. \quad (17.62)$$

Для этого необходимо получить собственные функции оператора $L\sigma$, которые построены из функций, соответствующих определенному значению l .

Матрицу L_σ можно записать следующим образом:

$$L_\sigma = \begin{pmatrix} L_z & L_x - iL_y \\ L_x + iL_y & -L_z \end{pmatrix}. \quad (17.63)$$

Удобнее записывать волновую функцию в виде вектора-столбца, компоненты которого являются функциями ϑ и φ :

$$\psi = \begin{pmatrix} f_1(\vartheta, \varphi) \\ f_2(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}. \quad (17.64)$$

Для собственных функций с собственным значением λ получаем

$$L_\sigma \psi = \begin{pmatrix} L_z f_1 + (L_x - iL_y) f_2 \\ -L_z f_2 + (L_x + iL_y) f_1 \end{pmatrix} = \lambda \hbar \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}. \quad (17.65)$$

Наши уравнения принимают вид

$$\left. \begin{aligned} L_z f_1 + (L_x - iL_y) f_2 &= \lambda \hbar f_1, \\ -L_z f_2 + (L_x + iL_y) f_1 &= \lambda \hbar f_2. \end{aligned} \right\} \quad (17.66)$$

Из уравнений (17.3) следует, что $(L_x + iL_y)\psi_m \sim \psi_{m+1}$ и $(L_x - iL_y)\psi_m \sim \psi_{m-1}$. Если выбрать $f_2 = C_2 Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ и $f_1 = C_1 Y_l^{m-1}(\vartheta, \varphi)$, то можно удовлетворить этим двум уравнениям, поскольку в соответствии с (17.10) и (17.11) имеем

$$\begin{aligned} (L_x - iL_y) Y_l^m &= \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_l^{m-1}, \\ (L_x + iL_y) Y_l^{m-1} &= \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_l^m. \end{aligned}$$

Мы здесь для удобства воспользуемся квантовым числом m , поскольку предыдущие результаты связаны с операциями над шаровыми функциями, которые выражены через m . Однако в данном случае надо помнить, что число m определяется через квантовое число k наблюдаемой величины J_z :

$$m = k - \frac{S_z}{\hbar}.$$

Получающиеся функции, как правило, не будут собственными функциями L_z .

Тогда уравнения (17.66) переходят в (при $L_z Y_l^m = m Y_l^m$)

$$\left. \begin{aligned} (m-1)C_1 + \sqrt{(l+m)(l-m+1)}C_2 &= \lambda C_1, \\ -mC_2 + \sqrt{(l+m)(l-m+1)}C_1 &= \lambda C_2. \end{aligned} \right\} \quad (17.67)$$

Уравнение для определения λ имеет вид

$$(\lambda - m + 1)(\lambda + m) = (l + m)(l - m + 1) = l(l + 1) - m(m - 1).$$

Оно сводится к

$$\lambda^2 + \lambda = l^2 + l. \quad (17.68)$$

Решениями этого уравнения являются $\lambda = l$ или $\lambda = -1 - l$. Подстановка этих значений λ в уравнение (17.62) дает

$$\left. \begin{aligned} \frac{J_a^2}{\hbar^2} &= l(l+1) + \frac{3}{4} + l = \left(l + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{3}{2}\right), \\ \frac{J_b^2}{\hbar^2} &= l(l+1) - l - \frac{1}{4} = \left(l - \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{1}{2}\right), \end{aligned} \right\} \quad (17.69)$$

где J_a и J_b относятся соответственно к собственным значениям l и $-1 - l$. Вводя обозначение

$$j_a = l + \frac{1}{2}, \quad j_b = l - \frac{1}{2}, \quad (17.70)$$

для обоих случаев получаем

$$\frac{J^2}{\hbar^2} = j(j+1). \quad (17.71)$$

Итак, мы приходим к выводу, который согласуется с выводом, получающимся из векторного правила, а именно, что значения j равны $l + \frac{1}{2}$ и $l - \frac{1}{2}$.

Собственные функции, соответствующие определенным значениям J^2 , можно получить подстановкой соответствующих значений λ в уравнения (17.67). При определении этих функций учтем, что они являются одновременно собственными функциями, соответствующими операторам с собственными значениями

$$\begin{aligned} J_z &= k\hbar, \\ J^2 &= j(j+1)\hbar^2, \\ L^2 &= l(l+1)\hbar^2. \end{aligned}$$

Поэтому волновую функцию можно записать в виде

$$\psi = \varphi_{l, j}^k. \quad (17.72)$$

Тогда нормированные собственные функции имеют вид

$$\left. \begin{aligned} \varphi_{l, l+\frac{1}{2}}^k &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{bmatrix} \sqrt{l+k} Y_l^{k-\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \\ \sqrt{l-k+1} Y_l^{k+\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \end{bmatrix}, \\ \varphi_{l, l-\frac{1}{2}}^k &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{bmatrix} \sqrt{l-k+1} Y_l^{k-\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \\ -\sqrt{l+k} Y_l^{k+\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \end{bmatrix}. \end{aligned} \right\} \quad (17.73)$$

Заметим, что здесь k — полуцелые числа, так что $k + \frac{1}{2}$ и $k - \frac{1}{2}$ являются целыми числами. Для проверки того, что вышеприведенные функции являются собственными функциями $J_z = L_z + \frac{\sigma_z \hbar}{2}$, следует подействовать этим оператором на волновую функцию и убедиться, что при этом получается $J_z = \hbar k$.

В представлении в виде матрицы-столбца первоначальные функции примут вид

$$\left. \begin{aligned} \psi_{l,1}^k &= \begin{pmatrix} Y_l^{k-\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \psi_{l,-1}^k &= \begin{pmatrix} 0 \\ Y_l^{k+\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}. \end{aligned} \right\} \quad (17.74)$$

Ясно, что функции $\varphi_{l,j}^k$ являются линейными комбинациями функций ψ , а именно:

$$\left. \begin{aligned} \varphi_{l,l+\frac{1}{2}}^k &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} (V\overline{l+k} \psi_{l,1}^k + V\overline{l-k+1} \psi_{l,-1}^k), \\ \varphi_{l,l-\frac{1}{2}}^k &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} (V\overline{l-k+1} \psi_{l,1}^k - V\overline{l+k} \psi_{l,-1}^k). \end{aligned} \right\} \quad (17.75)$$

Эти уравнения также можно решить относительно ψ :

$$\left. \begin{aligned} \psi_{l,1}^k &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left(V\overline{l+k} \varphi_{l,l+\frac{1}{2}}^k + V\overline{l-k+1} \varphi_{l,l-\frac{1}{2}}^k \right), \\ \psi_{l,-1}^k &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left(V\overline{l-k+1} \varphi_{l,l+\frac{1}{2}}^k - V\overline{l+k} \varphi_{l,l-\frac{1}{2}}^k \right). \end{aligned} \right\} \quad (17.76)$$

Итак, φ и ψ связаны между собой линейным преобразованием. Мы заключаем также, что в этом случае возможные значения j в точности равны тем, которые предсказывались векторным правилом.

12. Общая задача сложения моментов количества движения. Переходим теперь к обсуждению более общей задачи определения волновой функции сложной системы, содержащей два различных типа моментов. Эту задачу можно решать методами, аналогичными тем, которые применялись в рассмотренных здесь частных случаях (см. [44], гл. 3), или более мощными методами теории групп [41]. Хотя детали этих расчетов довольно сложны, но получается тот же общий результат. Он заключается в том, что если $\psi_{l_1}^{m_1}$ и $\psi_{l_2}^{m_2}$ являются

волновыми функциями систем, имеющих соответственно

$$\text{и} \quad \left. \begin{aligned} L^2 &= l_1(l_1 + 1)\hbar^2, & L_z &= m_1\hbar \\ L^2 &= l_2(l_2 + 1)\hbar^2, & L_z &= m_2\hbar, \end{aligned} \right\} \quad (17.77a)$$

где $l_1 > l_2$, то произведение этих функций можно разложить в ряд аналогично уравнениям (17.76):

$$\psi_{l_1}^{m_1} \psi_{l_2}^{m_2} = \sum_{x=-l_1}^{x=l_1} \varphi_{l_1+x}^{m_1+m_2} C_{l_1, m_1, m_2, x}; \quad (17.77b)$$

$\varphi_{l+x}^{m_1+m_2}$ — волновая функция, у которой *)

$$M^2 = (l+x)(l+x+1)$$

и $M_z = m_1 + m_2$, а все C — соответствующие постоянные **). Этот результат означает, что область моментов количества движения, которые могут быть у сложной системы, точно совпадает с той, которая дается векторным правилом. Уравнения (17.77a), как будет доказано в гл. 18, чрезвычайно полезны при выводе правил отбора.

13. Энергия электрона со спином *).** Как показано в п. 1, спин электрона связан с его магнитным моментом — $e\hbar/2mc$ ****), где m — масса электрона. Это означает, что в магнитном поле $\mathcal{H}$ спин обуславливает следующую добавку к оператору Гамильтона:

$$W = -\frac{e\hbar}{2mc} \sigma \mathcal{H} = -\frac{e\hbar}{2mc} \begin{pmatrix} \mathcal{H}_z & \mathcal{H}_x - i\mathcal{H}_y \\ \mathcal{H}_x + i\mathcal{H}_y & -\mathcal{H}_z \end{pmatrix}. \quad (17.78)$$

Это нерелятивистское выражение энергии спина. Полное релятивистское выражение можно дать только с помощью уравнения Дирака. Однако с точностью до членов порядка v/c можно получить результат, приняв, что уравнение (17.78) описывает энергию в лоренцевской системе отсчета, в которой электрон находится в состоянии покоя. Тогда релятивистское обобщение уравнения (17.78) для произвольной системы координат имеет вид (с точностью до членов первого порядка в v/c)

$$W = -\frac{e\hbar}{2mc} \left(\sigma \mathcal{H} + \sigma \frac{[\mathbf{v}\mathcal{E}]}{c} \right). \quad (17.79)$$

Однако это выражение можно еще уточнить, приняв во внимание релятивистский эффект, называемый *прецессией Томаса*

*) M^2 и M_z относятся к собственным значениям полного орбитального момента и его z -компоненты.

**) Эти константы вычислены Кондоном и Шортли [44] и Вигнером [41].

***). Обсуждение энергии спина см. в [14], стр. 223 и 331. Качественное обсуждение см. в [40], гл. 8.

****) Здесь e означает абсолютную величину заряда электрона.

(см. [13], стр. 162), который уменьшает вдвое член, обусловленный электрическим полем. Получаем

$$W_{\text{сп}} = -\frac{e\hbar}{2mc} \left(\sigma \mathcal{H} + \frac{1}{2} \sigma \left[\frac{\mathbf{v}}{c} \mathbf{E} \right] \right). \quad (17.80)$$

Член $\frac{\sigma}{2} \left[\frac{\mathbf{v}}{c} \mathbf{E} \right]$ в атоме, где $\mathbf{E}$ означает электрическое поле ядра (и других электронов), является так называемым *спин-орбитальным* взаимодействием. Выражая поле через потенциал, получаем $\mathbf{E} = -\text{grad } \varphi$. В сферически симметричном атоме $\varphi = \varphi(r)$ и $\mathbf{E} = -\frac{\mathbf{r}}{r} \varphi'(r)$ и поэтому спин-орбитальная энергия принимает вид

$$W_{\text{сп}} = \frac{e\hbar}{2mc^2} \frac{\varphi'(r)}{mr} \sigma[\mathbf{pr}] = \frac{-e\hbar}{4mc^2} \frac{\varphi'(r)}{mr} (\mathbf{L}\sigma). \quad (17.81)$$

ЧАСТЬ IV

МЕТОДЫ ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА

ГЛАВА 18

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЯ, ЗАВИСЯЩЕГО И НЕ ЗАВИСЯЩЕГО ОТ ВРЕМЕНИ

1. Введение к части IV. В этой части будет изложено содержание приближенных методов решения уравнения Шрёдингера. Мы начнем с метода вариации постоянных, который будет использован для вычисления вероятностей переходов, особенно тех переходов, которые связаны с испусканием и поглощением света. Затем будут рассмотрены малые адиабатические возмущения, которые приводят к смещениям энергетических уровней и изменению собственных функций. Это приведет к проблеме больших, но медленно изменяющихся возмущений (общее адиабатическое приближение). Наконец, будет рассмотрен случай внезапных изменений потенциала (мгновенное возмущение). Все это завершит изучение общих методов приближения, применяющихся при решении уравнения Шрёдингера.

2. Случай малого возмущения (метод вариации постоянных). В этом случае имеет смысл начать с рассмотрения системы, для которой волновое уравнение может быть точно решено, а затем выяснить, что произойдет с этой системой под действием малых внешних возмущений. Например, рассмотрим атом водорода или гармонический осциллятор, к которому приложено слабое внешнее электромагнитное поле, могущее создаваться падающей световой волной или источником постоянного приложенного извне электрического поля. Из опытов известно, что атом может поглотить световой квант и перейти на более высокий энергетический уровень. Если внешнее электрическое поле постоянно во времени, то мы получим смещение энергетических уровней, известное под названием *эффекта Штарка*. Таким образом, внешнее возмущение вызывает изменение в системе, которую мы рассматривали как исходную.

В принципе, влияние внешних возмущений можно получить теоретически, из решения уравнения Шрёдингера, если включить в него внешний скалярный потенциал φ и векторный потенциал A . В большинстве случаев получающееся в результате этого уравнение, к сожа-

лению, слишком сложно, чтобы его можно было точно решить. Однако можно развить приближенные методы, которые основаны на разумном предположении, что небольшие изменения гамильтониана создают соответственно малые изменения в волновых функциях. С помощью этого предположения можно развить метод последовательных приближений, до некоторой степени аналогичный получению рядов для функции S в приближенном методе ВКБ (см. уравнение (12.7)). Метод этот известен как *теория возмущений*.

Применение этого метода начнем с рассмотрения волнового уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi. \quad (18.1)$$

Теория возмущений будет справедлива, только когда оператор Гамильтона может быть представлен в виде суммы двух членов

$$H = H_0 + \lambda V(x, p, t), \quad (18.2)$$

где H_0 — оператор Гамильтона невозмущенной системы, для которого предполагается, что собственные значения и собственные функции известны, а λV — малый возмущающий член. Коэффициент λ — безразмерная постоянная, определяющая величину возмущения. Примером такой задачи может служить задача об атоме водорода, который помещен в однородное электрическое поле, слабое по сравнению с электрическими полями атомов. Тогда гамильтониан имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} + e\mathcal{E}x, \quad (18.3)$$

где $\mathcal{E}$ — напряженность возмущающего электрического поля, приложенного в направлении x . В этом случае $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r}$, а возмущающий потенциал равен $\lambda V = e\mathcal{E}x$; здесь параметр λ можно считать равным электрическому полю $\mathcal{E}$. В более общем случае возмущающий член λV может зависеть и от операторов импульса p , а также координат x . Он может также зависеть и от времени. Например, внешнее электрическое поле в разбираемом выше примере может быть функцией времени.

Если параметр λ достаточно мал, т. е. если возмущающие силы достаточно слабы, то решение волнового уравнения не будет сильно отличаться от решения, соответствующего отсутствию возмущения при $\lambda = 0$. Но когда $\lambda = 0$, решение можно разложить в ряд по собственным функциям H_0 , которые мы обозначим через $U_n(x) e^{-iE_n^0 t/\hbar}$ (E_n^0 представляет n -е собственное значение H_0):

$$\psi_{\lambda=0} = \sum_n C_n U_n e^{-iE_n^0 t/\hbar}, \quad (18.4)$$

где C_n — произвольная постоянная.

В методе решения при $\lambda \neq 0$ предполагается, что и в общем случае можно в любой момент t разложить произвольную функцию $\psi(x)$ в ряд по функциям $U_n(x)$. Так как функция ψ изменяется со временем, то коэффициенты при $U_n(x)$ должны быть в общем случае функциями времени. Если зависимость коэффициентов от времени дается выражением $C_n e^{-iE_n^0 t/\hbar}$, где C_n — постоянная, то эти ряды будут давать решение невозмущенного волнового уравнения $(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_0 \psi)$. В более общем случае коэффициенты изменяются со временем сложнее, так что если выразить волновую функцию в виде ряда $\psi = \sum_n C_n e^{-iE_n^0 t/\hbar} U_n(x)$, то C_n в свою очередь будут функциями времени. Вот поэтому-то рассматриваемый метод и называется *методом вариации постоянных*.

Для получения решения подставим написанный выше ряд (где C_n — функция времени) в уравнение Шрёдингера (18.1). В результате получим

$$\begin{aligned} \sum_n (i\hbar \dot{C}_n + E_n^0 C_n) U_n(x) e^{-iE_n^0 t/\hbar} = \\ = \sum_n E_n^0 e^{-iE_n^0 t/\hbar} U_n(x) C_n + \lambda \sum_n V C_n U_n(x) e^{-iE_n^0 t/\hbar}. \end{aligned} \quad (18.5)$$

После сокращения имеем

$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) U_n(x) e^{-iE_n^0 t/\hbar} = \lambda \sum_n C_n V U_n(x) e^{-iE_n^0 t/\hbar}.$$

Умножим это уравнение на $U_m^*(x) e^{iE_m^0 t/\hbar}$, а затем проинтегрируем почленно по всей области изменения x . Используя нормировку и ортогональность функций U_n , получим

$$i\hbar \dot{C}_m = \lambda \sum_n C_n e^{i(E_m^0 - E_n^0)t/\hbar} V_{mn}, \quad (18.6)$$

где

$$V_{mn} = \int U_m^*(x) V(x, p, t) U_n(x) dx, \quad (18.7)$$

dx — элемент объема $dx dy dz$. V_{mn} означает (m, n) -й матричный элемент оператора V в представлении, для которого гамильтониан H_0 диагонален (см. уравнение (16.2)). Заметим, что в общем случае элементы V_{mn} являются функциями времени.

Вообще уравнения (18.6) представляют систему бесконечного числа линейных уравнений, определяющих каждый данный коэффициент C_m через все величины C_n . Точное решение зависит от значения каждого V_{mn} и от начальных значений каждого C_n . Значе-

ние V_{mn} в свою очередь определяется формой возмущающего потенциала и собственными функциями U_n невозмущенного гамильтониана. Поэтому временная зависимость C_n зависит и от формы возмущающего потенциала, и от типа исходной невозмущенной системы.

Описанная здесь процедура по существу эквивалентна разложению волновой функции в ряд по решениям уравнения Шрёдингера невозмущенной системы. Если бы энергия взаимодействия была равна нулю, то это было бы точным решением для всей системы и мы имели бы гейзенберговское представление для волновой функции (см. гл. 16, п. 21). Однако, когда энергия взаимодействия не исчезает, мы имеем дело не с гейзенберговским представлением, потому что члены U_n не являются больше собственными функциями оператора энергии, который теперь равен $H_0 + \lambda V$.

3. Граничные условия. Граничные условия этих уравнений обычно определяются в предположении, что до некоторого времени t_0 возмущающий потенциал отсутствовал. Каков физический смысл этого предположения? В случае световой волны, например, мы можем образовать пакет, который впервые столкнулся с атомом при $t = t_0$. Для постоянного электрического поля t_0 может означать время, при котором это поле впервые было включено. В случае других типов возмущения можно видеть, что обычно существует какой-то момент времени, до которого величина возмущения была ничтожно малой. Наиболее общее выражение волновой функции возможного состояния до $t = t_0$, согласно теореме разложения, имеет вид

$$\psi = \sum_n A_n \exp\left(\frac{-iE_n^0 t}{\hbar}\right) U_n(\mathbf{x}),$$

где A_n — произвольные постоянные, удовлетворяющие лишь условию нормировки. Практически очень часто реализуется такой случай, когда система находится в каком-то определенном одном стационарном состоянии, так что волновая функция равна

$$U_s e^{-iE_s^0 t/\hbar} e^{i\varphi},$$

где φ — постоянный фазовый множитель, не имеющий физического значения (см. гл. 6, п. 3). Такая волновая функция может получиться, например, в опыте с атомом, находящимся в основном состоянии, когда затем этот атом освещается или же налагается электрическое или магнитное поле.

Мы рассмотрим здесь граничные условия только для системы, находящейся в каком-то одном из возможных стационарных состояний. Более общие граничные условия, которые представляют меньший физический интерес, легко получить простым обобщением методов, развитых в этой главе.

4. Методы приближения. Для моментов времени, больших $t = t_0$, прежняя волновая функция не будет уже больше решением волнового

уравнения. Нашей задачей теперь будет являться приближенное определение изменения коэффициентов C_n , возникающего в результате появления возмущающего потенциала. При этом метод приближения будет основан на том, что, как можно видеть из уравнения (18.6), изменения коэффициентов C_n со временем пропорциональны параметру λ . Мы предполагаем, что при $t=t_0$ все C_n равны нулю, за исключением одного, а именно C_s , который можно принять равным единице с точностью до несущественного произвольного фазового коэффициента. Вследствие малости $\dot{C}_n$ мы можем сказать, что по крайней мере для некоторого интервала времени после $t=t_0$ (величина которого зависит от λ) все C_n (кроме C_s) малы и действительно пропорциональны λ , в то время как коэффициент C_s остается близким к единице. Таким образом, в первом приближении можно получить решение для $\dot{C}_m$, когда $m \neq s$, подставляя в правую часть уравнения (18.6) $C_n=0$ и $C_s=1$. Это дает

$$i\hbar\dot{C}_m = \lambda e^{i(E_m^0 - E_s^0)t/\hbar} V_{ms}(t). \quad (18.8)$$

Это уравнение будет являться хорошим приближением, пока коэффициенты C_m , определяемые из него, не станут большими. Критерий применимости этого уравнения будет рассмотрен в п. 7.

Интегрирование уравнения (18.8) дает

$$C_m = -\frac{i}{\hbar} \lambda \int_{t_0}^t e^{i(E_m^0 - E_s^0)t'/\hbar} V_{ms}(t') dt'. \quad (18.9a)$$

Интересно также вычислить первое приближение к C_s , т. е. к коэффициенту исходной собственной функции. Заметим, что

$$i\hbar\dot{C}_s = \lambda V_{ss}(t) C_s + \lambda \sum_{n \neq s} C_n e^{i(E_s^0 - E_n^0)t/\hbar} V_{sn}(t). \quad (18.9b)$$

Так как $C_n \sim \lambda$ при $n \neq s$, то сумма в правой части записанного уравнения пропорциональна λ^2 , и потому в первом приближении ею можно пренебречь. Тогда мы получаем

$$i\hbar\dot{C}_s \cong \lambda V_{ss}(t) C_s. \quad (18.10)$$

Это уравнение легко проинтегрировать:

$$C_s \cong e^{-i\lambda \int_{t_0}^t V_{ss} dt'/\hbar}. \quad (18.11)$$

Если V_{ss} не зависит от времени, то уравнение (18.11) принимает вид

$$C_s \cong e^{-i\lambda V_{ss}(t-t_0)/\hbar}. \quad (18.12a)$$

Позже мы вернемся к этому уравнению. Следует отметить два момента, связанные с полученными выше результатами:

1) Член, содержащий V_{ss} , входит только через показатель экспоненциала, так что он не изменяет абсолютного значения C_s . Поэтому он не меняет ни выражения для плотности вероятности состояния, ни для вероятности переходов.

2) В первом приближении член, содержащий V_{ss} , влияет лишь на изменение угловой частоты колебаний волновой функции на величину $\lambda V_{ss}/\hbar$. Это эквивалентно изменению невозмущенной энергии на λV_{ss} . В первом приближении энергия, таким образом, становится равной

$$E = E_s + \lambda V_{ss}. \quad (18.126)$$

Но $\lambda V_{ss} = \lambda \int U_s^* V U_s dx$, что как раз равно среднему значению возмущающего потенциала, взятого с невозмущенной волновой функцией. Подобные результаты получались в классической теории возмущений, где первое приближение для поправки энергии может быть получено из среднего по времени возмущающего потенциала, взятого за период [3].

5. Связь величин $|C_m|^2$ с вероятностями переходов. В гл. 10, п. 29 было показано, что величина $|C_m|^2$ дает вероятность нахождения системы в состоянии, для которого невозмущенный гамильтониан H_0 имеет собственное значение E_m^0 . Так как эту вероятность мы положили равной нулю при $t = t_0$, то, следовательно, величина $|C_m|^2$ дает вероятность перехода из s -го в m -е собственное состояние H_0 после момента $t = t_0$. Хотя коэффициенты C_m изменяются непрерывно со скоростью, определяемой уравнением Шрёдингера, а также граничными условиями при $t = t_0$, система в действительности претерпевает скачкообразный и квантованный переход из одного состояния в другое. Наличие этого перехода можно было бы продемонстрировать, например, если бы возмущающий потенциал действовал короткое время после момента $t = t_0$, пока C_m еще очень малы. Если проделать такой опыт последовательно много раз, то было бы обнаружено, что система всегда остается в каком-то из собственных состояний оператора H_0 . В подавляющем большинстве случаев система должна оставаться в своем первоначальном состоянии, но в некоторых случаях, число которых пропорционально $|C_m|^2$, система должна оставаться в m -м состоянии. Таким образом, мы должны считать, что возмущающий потенциал обуславливает квантованные переходы в другие собственные состояния оператора H_0 *).

*) Действительно, в квантовых переходах заключен дискретный, атомистический характер микроявлений. Однако нужно помнить, что во время действия возмущения состояние системы нестационарно и только после «снятия» возмущения система будет находиться в каком-то из своих возможных стационарных состояний. — *Прим. ред.*

6. Вычисление коэффициентов C_m . Общее выражение C_m существенно зависит от того, как матричные элементы V_{mn} изменяются со временем. Однако имеет смысл выделить три случая, когда задача легко решается и которые весьма часто встречаются в практических условиях. Эти три случая следующие:

- а) V_{mn} возникают внезапно в момент $t = t_0$;
- б) V_{mn} гармонически колеблются со временем;
- в) V_{mn} возникают очень медленно со временем (адиабатический случай).

7. Случай а: внезапное (мгновенное) появление элементов V_{mn} (приближение до первого порядка λ). В этом случае коэффициенты C_m можно определить непосредственно, интегрируя уравнение (18.9а), когда первоначально система была в s -м собственном состоянии. В результате получаем

$$C_m = \frac{e^{i(E_m^0 - E_s^0)t_0/\hbar}}{E_m^0 - E_s^0} \left(1 - e^{i(E_m^0 - E_s^0)(t - t_0)/\hbar}\right) \lambda V_{ms}. \quad (18.13)$$

Отсюда видно, что величины C_m являются колеблющимися функциями времени. Вероятность того, что система находится в m -м собственном состоянии H_0 , равна

$$\begin{aligned} |C_m|^2 &= \frac{\lambda^2 |V_{ms}|^2 \left|1 - e^{i(E_m^0 - E_s^0)(t - t_0)/\hbar}\right|^2}{(E_m^0 - E_s^0)^2} = \\ &= \frac{4\lambda^2 |V_{ms}|^2}{(E_m^0 - E_s^0)^2} \sin^2 \left[\frac{(E_m^0 - E_s^0)(t - t_0)}{2\hbar} \right]. \end{aligned} \quad (18.14a)$$

Эта вероятность колеблется с угловой частотой $\omega = \frac{(E_m^0 - E_s^0)}{\hbar}$ и достигает максимума каждый раз, когда $\frac{(E_m^0 - E_s^0)(t - t_0)}{2\hbar} = \left(N + \frac{1}{2}\right)\pi$. Максимальное значение вероятности равно

$$|C_m|_{\max}^2 = \frac{4\lambda^2 |V_{ms}|^2}{(E_m^0 - E_s^0)^2}. \quad (18.14б)$$

Такое поведение напоминает гармонический осциллятор, совершающий вынужденные колебания под действием периодически возмущающей силы частоты ω , которая отличается от собственной частоты ω_0 осциллятора (см. уравнение (2.37)). В этом случае амплитуда колебаний возрастает и убывает с частотой биений $\omega - \omega_0$.

Полная вероятность того, что система совершает переход из s -состояния, равна сумме величин $|C_m|^2$ для всех m , за исключением $m = s$.

Эта вероятность равна

$$P = \sum_{s \neq m} |C_m|^2 = 4\lambda^2 \sum_{m \neq s} \frac{|V_{ms}|^2}{(E_m^0 - E_s^0)^2} \sin^2 \left[\frac{(E_m^0 - E_s^0)(t - t_0)}{2\hbar} \right]. \quad (18.15a)$$

В рамках принятого здесь приближения теория возмущений будет справедлива, если вероятность P мала по сравнению с единицей. Когда это требование выполнено, то все C_m (при $m \neq s$) будут малы, а коэффициент C_s не будет сильно изменяться по сравнению с единицей. Так как

$$\sin^2 \frac{(E_m^0 - E_s^0)(t - t_0)}{2\hbar} \leq 1,$$

то можно написать

$$P \leq 4\lambda^2 \sum_{m \neq s} \frac{|V_{ms}|^2}{(E_m^0 - E_s^0)^2}. \quad (18.15б)$$

Таким образом, достаточным условием справедливости теории возмущений для любого момента времени является следующее:

$$4\lambda^2 \sum_{m \neq s} \frac{|V_{ms}|^2}{(E_m^0 - E_s^0)^2} \ll 1. \quad (18.15в)$$

Это условие всегда может выполняться, если сделать параметр λ достаточно малым и если нет вырожденных энергетических уровней (т. е. равенство $E_m^0 = E_s^0$ не имеет места при всех $m \neq s$). Отсюда ясно, что случай вырожденных энергетических уровней может быть существенным в задачах теории возмущений.

8. Возмущение вырожденных состояний. Если есть энергетические уровни, для которых $E_m^0 = E_s^0$, то уравнение (18.14а) становится неприменимым. В этом случае коэффициенты C_m могут быть получены из уравнения (18.8):

$$C_m = -\frac{i}{\hbar} \lambda V_{ms}(t - t_0). \quad (18.16)$$

Отсюда видно, что величины C_m неограниченно возрастают со временем *). Следовательно, если система вырождена, то развитая здесь теория возмущений становится неприменимой по истечении достаточно большого промежутка времени. Метод решения задач теории возмущений для вырожденных систем для больших интервалов времени будет специально рассмотрен в гл. 19.

*) Это можно сравнить с гармоническим осциллятором в случае, когда возмущающая сила находится в резонансе с собственной частотой (см. уравнение (2.35)).

9. Описание переходов с помощью квантовых флуктуаций.

Мы хотим теперь наметить путь более наглядного изображения описанных выше процессов перехода. Рассмотрим прежде всего невырожденный случай, когда, как это следует из уравнения (18.14а), коэффициенты C_m некоторое время растут, затем уменьшаются, затем снова растут и т. д., но никогда не превышают определенных конечных максимальных значений. Это означает, что система стремится совершить переходы в другие квантовые состояния, но что эти переходы меняют знак за время порядка $\tau = \frac{h}{(E_m^0 - E_s^0)}$. Следовательно,

чем меньше разность $E_m^0 - E_s^0$, тем больше интервал времени, благоприятный для перехода на m -й уровень, и в результате тем больше будет максимальное значение коэффициента C_m .

В этой связи надо напомнить, что полная энергия системы равна не H_0 , а $H_0 + \lambda V$, поэтому описание переходов при помощи собственных состояний H_0 не является, строго говоря, описанием с помощью переходов между определенными энергетическими уровнями. Несмотря на это, в силу малости λ добавка возмущающего потенциала к полной энергии также мала (см. уравнение (18.126)). Это означает, что E_s^0 и E_m^0 можно еще рассматривать как приближенные собственные значения энергии.

На основе этих замечаний можно представить себе, что система, на которую действует возмущающий потенциал, находится в состоянии непрерывных флуктуаций, переходя из одного собственного состояния невозмущенного гамильтониана H_0 в другое и обратно. Другими словами, когда действует возмущение, система начинает совершать переходы между всеми возможными энергетическими уровнями. Если бы система перманентно оставалась в собственном состоянии H_0 , соответствующем невозмущенной энергии E_m^0 , которая сильно отличалась бы от начального значения E_s^0 невозмущенной энергии, то возникло бы противоречие с законом сохранения энергии. Это связано с тем, что, как мы видели, добавка возмущающего потенциала к энергии системы очень мала, в то время как разность $E_m^0 - E_s^0$ может быть в общем случае довольно велика. Однако это противоречие снимается, поскольку система остается в новом состоянии в течение настолько короткого интервала времени, что, согласно принципу неопределенности, энергия не может быть определена в пределах $E_m^0 - E_s^0$. Только если $E_m^0 = E_s^0$, т. е. когда в системе имеется вырождение, переход может происходить в одном и том же направлении бесконечно долго без нарушения закона сохранения энергии.

Приведенная трактовка содержит изменение классических представлений о том, что система движется по некоторой определенной

траектории. Здесь предполагается, что под влиянием возмущающего потенциала система стремится совершать переходы во всех направлениях одновременно. Однако только определенные типы переходов могут протекать бесконечно долго в одном и том же направлении, а именно те, для которых энергия сохраняется постоянной. Во многих отношениях это представление напоминает понятие развития в биологии, где утверждается, что в результате мутации могут появиться все виды, но лишь некоторые виды могут выжить длительное время, а именно те, которые удовлетворяют определенным требованиям, чтобы выжить в специфической среде, окружающей вид. Все же не надо слишком увлекаться этой аналогией, так как живая система должна принадлежать к тому или иному виду, но не к двум одновременно. С другой стороны, как мы видели в гл. 6, когда волновая функция включает сумму из многих квантовых состояний, то надо представлять себе, что система покрывает все эти состояния одновременно, потому что важные физические свойства могут зависеть от интерференции между волновыми функциями, соответствующими этим различным состояниям *).

Иногда переходы с сохранением энергии называются *действительными* переходами, чтобы отличить их от так называемых *виртуальных* переходов, при которых не сохраняется энергия и которые поэтому должны менять свое направление, если они продолжаются. Эта терминология не совсем удачна, так как здесь предполагается, что виртуальные переходы не имеют реального значения. Наоборот, они часто чрезвычайно важны, потому что множество физических процессов является следствием этих, так называемых *виртуальных* переходов. Например, в гл. 19, п. 13 будет показано, что ван-дер-ваальсовское притяжение между молекулами есть результат виртуальных переходов.

10. Микроскопическая обратимость процессов перехода. Из уравнения (9.23) видно, что, в силу эрмитовости оператора V , $V_{mn} = V_{nm}^*$. Но $|V_{mn}|^2$ пропорционально вероятности того, что система, находившаяся первоначально в n -м состоянии, совершает

*) Как было показано в гл. 6, пп. 9, 10 и 13 и в гл. 16, п. 25, квантовую систему следует описывать с помощью не полностью определенных потенциальных возможностей, которые реализуются более определенно только при взаимодействии с соответствующими внешними системами. Однако, пока существует определенное фазовое соотношение между коэффициентами C_n , нельзя считать, что система имеет единственное (но неизвестное) значение невозмущенного гамильтониана. Только после того, как она провзаимодействует с подходящей системой (скажем, с аппаратурой, измеряющей H_0), в ней установится определенное значение H_0 и величина $|C_n(t)|^2$ будет давать вероятность того, что это значение будет равно E_n в предположении (как это указывалось в п. 5) о внезапном возникновении возмущающего потенциала в момент t . Сравните все это также с описанием процесса перехода в гл. 22, п. 14.

переход в m -е состояние, а $|V_{nm}|^2$ пропорционально вероятности того, что система, находившаяся первоначально в m -м состоянии, совершает переход в n -е состояние. В силу написанного выше равенства обе эти вероятности равны. Это свойство часто называют *микроскопической обратимостью* квантовых процессов. Это есть квантовая аналогия микроскопической обратимости классических уравнений движения *). Действительно, микроскопическая обратимость всех квантовых процессов в соответствующем пределе должна привести к микроскопической обратимости всех видов классических движений.

11. Сохранение вероятности. Из уравнения (18.15а) видно, что полная вероятность того, что совершится переход с s -го уровня, пропорциональна λ^2 . Так как вероятность сохраняется, то эта вероятность перехода должна компенсироваться равным уменьшением вероятности того, что система остается в начальном состоянии. Но так как изменение вероятности второго порядка малости по λ , то для определения этого уменьшения величины $|C_s|^2$ коэффициент C_s нужно вычислить также с точностью до членов второго порядка малости.

Коэффициент C_s можно вычислить с точностью до членов второго порядка малости из уравнения (18.6), используя первое приближение для коэффициентов C_m . Однако удобно предварительно совершить подстановку $C_n = e^{-i\lambda V_{nn}t/\hbar} A_n$. Тогда уравнение (18.6) упростится **):

$$i\hbar \dot{A}_m = \lambda \sum_{n \neq m} e^{i(E_m^0 - E_n^0)t/\hbar} V_{mn} A_n. \quad (18.17)$$

Полагая в этом уравнении $m = s$, получим

$$i\hbar \dot{A}_s = \lambda \sum_{n \neq s} e^{i(E_s^0 - E_n^0)t/\hbar} V_{sn} A_n. \quad (18.18)$$

*) Любому решению уравнений движения всегда соответствует другое решение, в котором все частицы имеют точно такие же, но противоположно направленные скорости, поэтому частицы совершают и обратные движения. Это свойство называется микроскопической обратимостью, чтобы отличить его от свойств макроскопических систем, которым в общем случае присущ необратимый характер их движения. В статистической механике показывается, что макроскопическая необратимость возникает вследствие существования множества различных микроскопических состояний системы, которые невозможно различить в макроскопическом (или термодинамическом) смысле. В результате, когда частицы движутся и рассеиваются друг на друге, то результирующий эффект приводит к хаотическому перемешиванию, при котором совершенно невероятно, чтобы когда-нибудь было воспроизведено первоначальное микросостояние. В квантовой теории, как мы видели, основные процессы также микроскопически обратимы, но в макроскопической системе возникает необратимость благодаря действию тех же типов эффектов хаотического перемешивания (см., например, [15]).

**) Заметим, что мы пренебрегали членом λV_{nn} , когда он появлялся в показателе степени, поскольку он в большинстве случаев дает поправку в конечном результате, пропорциональную λ^3 .

Взяв выражение для A_n из уравнения (18.13) и пренебрегая членами второго и высших порядков малости, получаем

$$i\hbar \dot{A}_s = -\lambda^2 \sum_{n \neq s} e^{i(E_s^0 - E_n^0)t/\hbar} V_{sn} V_{ns} \frac{[e^{i(E_n^0 - E_s^0)t/\hbar} - e^{i(E_n^0 - E_s^0)t_0/\hbar}]}{(E_n^0 - E_s^0)}.$$

Интегрирование дает (заметим, что $(A_s)_{t=t_0} = 1$):

$$A_s = 1 + \lambda^2 \sum_{n \neq s} \frac{V_{sn} V_{ns}}{(E_s^0 - E_n^0)^2} [e^{i(E_s^0 - E_n^0)(t-t_0)/\hbar} - 1] - \\ - \frac{i\lambda^2}{\hbar} \sum_{n \neq s} \frac{V_{sn} V_{ns} (t-t_0)}{(E_s^0 - E_n^0)}. \quad (18.19)$$

Квадрат абсолютной величины этого выражения равен (заметим, что согласно сказанному в п. 10, $V_{ns} = V_{sn}^*$, и оставим только члены вплоть до λ^2)

$$|A_s|^2 = 1 - 2\lambda^2 \sum_{n \neq s} \left\{ 1 - \cos \left[\frac{(E_s^0 - E_n^0)}{\hbar} (t - t_0) \right] \right\} \frac{|V_{sn}|^2}{(E_s^0 - E_n^0)^2} = \\ = 1 - 4\lambda^2 \sum_{n \neq s} \frac{|V_{sn}|^2}{(E_s^0 - E_n^0)^2} \sin^2 \left[\frac{(E_s^0 - E_n^0)}{\hbar} (t - t_0) \right]. \quad (18.20)$$

Если учесть уравнение (18.15а), то, как видно из выражения (18.20), уменьшение $|A_s|^2$ со временем как раз равно полной вероятности того, что система совершит переход из основного состояния. Таким образом, вероятность сохраняется.

Кроме того, из выражения (18.20) видно, что вероятность $|A_s|^2$ отличается от единицы только на член второго порядка малости. Поэтому ошибка при вычислении коэффициентов A_m , вносимая предположением, что $A_s = 1$, будет относиться по крайней мере к поправкам третьего порядка малости.

12. Случай б: гармоническое изменение матричных элементов V_{mn} со временем, задача поглощения и испускания света. Есть много важных задач, в которых матричные элементы V_{mn} изменяются гармонически со временем. В качестве примера можно рассмотреть атом, помещенный в слабое электрическое поле, которое совершает колебания с некоторой угловой частотой ω . В этом случае, приняв, что поле направлено вдоль оси x , мы должны добавить к гамильтониану возмущающий член

$$e\mathcal{E}_0 x \cos \omega t. \quad (18.21)$$

Более важным примером является задача определения состояний атома, освещаемого светом с определенной угловой частотой ω . Для электромагнитной волны требуется рассматривать только векторный

потенциал A (см. гл. 1, п. 3). Тогда гамильтониан может быть записан в таком виде *) (см. уравнение (15.47)):

$$H = \frac{p^2}{2m} + V - \frac{e}{2mc} (A\mathbf{p} + \mathbf{p}A) + \frac{e^2}{2mc^2} A^2, \quad (18.22)$$

V — потенциал, создаваемый всеми силами, действующими на атом, кроме сил, которые возникают от падающего электромагнитного излучения.

Так как мы ограничились случаем слабо возмущающего электромагнитного поля, то можно пренебречь членом, включающим A^2 , который будет второго порядка малости **). Тогда матричный элемент V_{mn} дается выражением

$$\lambda V_{mn} = -\frac{e}{2mc} \int U_m^*(\mathbf{x}) (A\mathbf{p} + \mathbf{p}A) U_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (18.23)$$

Для световой волны с определенной угловой частотой можно написать

$$A = G(\mathbf{x}) e^{-i\omega t} + G^*(\mathbf{x}) e^{i\omega t}.$$

Чтобы потенциал A оставался вещественной величиной, должен быть добавлен комплексно сопряженный член. Тогда получаем

$$\lambda V_{mn} = -\frac{e}{2mc} \left[e^{-i\omega t} \int U_m^*(\mathbf{x}) (G\mathbf{p} + \mathbf{p}G) U_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + e^{i\omega t} \int U_m^*(\mathbf{x}) (G^*\mathbf{p} + \mathbf{p}G^*) U_n d\mathbf{x} \right].$$

Введем обозначение

$$G_{mn} = -\frac{e}{mc} \int U_m^*(\mathbf{x}) \frac{G\mathbf{p} + \mathbf{p}G}{2} U_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (18.24)$$

Тогда комплексно сопряженная величина от G_{mn} получится, если взять комплексно сопряженные от всех частей интеграла (18.24):

$$G_{mn}^* = -\frac{e}{mc} \int U_m(\mathbf{x}) \frac{G^*\mathbf{p} + \mathbf{p}G^*}{2} U_n^*(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (18.25)$$

Если совершить замену $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ и заметить, что $G = G(\mathbf{x})$, то с помощью интегрирования по частям можно легко показать (поскольку интегрируемая часть равна нулю), что

$$G_{mn}^* = -\frac{e}{mc} \int U_n^*(\mathbf{x}) \frac{G^*\mathbf{p} + \mathbf{p}G^*}{2} U_m(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (18.26)$$

*) При такой трактовке мы пренебрегаем спином электрона. Влияние спина будет рассмотрено в п. 50.

**) Такое пренебрежение справедливо, если, как это обычно бывает, матричный элемент V_{mn} не становится равным нулю. Если $V_{mn} = 0$, член с A^2 следует сохранить, потому что он будет главным членом, ответственным за переходы.

(Другими словами, p может действовать на U_m , а не на U_n^* .) В итоге приходим к следующему результату:

$$\lambda V_{mn} = G_{mn} e^{-i\omega t} + G_{nm}^* e^{i\omega t}. \quad (18.27)$$

Теперь можно вычислить коэффициент C_m с помощью уравнения (18.9а):

$$C_m = -\frac{i\lambda}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i(E_m^0 - E_s^0)t/\hbar} V_{ms}(t) dt = \\ = -[G_{ms} F(\omega) + G_{sm}^* F(-\omega)], \quad (18.28)$$

где

$$F(\omega) = e^{i(E_m^0 - E_s^0 - \omega\hbar)t/\hbar} \frac{[1 - e^{-i(E_m^0 - E_s^0 - \omega\hbar)(t-t_0)/\hbar}]}{E_m^0 - E_s^0 - \omega\hbar}. \quad (18.29)$$

13. Применение к случаю плоской волны. Обычно функцию G выбирают таким образом, что световая волна является плоской, хотя это и не обязательно. Мы можем, например, выбрать волну, распространяющуюся в направлении оси x , причем вектор $\mathbf{A}$ направлен вдоль оси z (см. уравнение (1.21)). (Заметим, что условие поперечности волн удовлетворяется, если вектор $\mathbf{A}$ нормален к направлению распространения волны.) Таким образом, можно написать

$$A_z = A_0 e^{i(kx - \omega t)} + A_0^* e^{-i(kx - \omega t)}. \quad (18.30)$$

Чтобы вычислить C_m , достаточно оценить величину G_{mn} с помощью сделанного выше выбора $\mathbf{A}$. В результате получаем (заметив, что $p_z e^{ikx} + e^{ikx} p_z = 2p_z e^{ikx}$)

$$G_{ms} = -\frac{eA_0}{mc} \int U_m^*(\mathbf{x}) p_z e^{ikx} U_s(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \frac{e}{mc} A_0 \alpha_{ms}, \quad (18.31a)$$

где

$$\alpha_{ms} = \int U_m^*(\mathbf{x}) p_z e^{ikx} U_s(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (18.31b)$$

Тогда окончательно находим

$$C_m = -\frac{e}{mc} A_0 [\alpha_{ms} F(\omega) + \alpha_{sm}^* F(-\omega)]. \quad (18.32)$$

14. Объяснение результатов п. 13. Полученные результаты весьма напоминают те, которые были получены для постоянного потенциала в п. 7, с тем исключением, что разность $E_m^0 - E_s^0$ заменена на $E_m^0 - E_s^0 \pm \hbar\omega$. Общий результат сводится к тому, что коэффициенты $|C_m|^2$ флуктуируют точно так же, как и при постоянных V_{ms} , за исключением случаев, когда $E_m - E_s = \pm \hbar\omega$. В последних случаях один из членов (либо $F(\omega)$, либо $F(-\omega)$) приводит к добавке,

неограниченно возрастающей со временем. Это показывает, что когда возмущающий член в гамильтониане колеблется с угловой частотой $\hbar\omega = |E_m^0 - E_s^0|$, то он вызывает односторонние переходы с m -го на s -й уровень, а также с s -го на m -й. Следовательно, свет с угловой частотой ω может непрерывно обмениваться энергией с электроном, только если выполняется условие $E_m^0 - E_s^0 = \pm \hbar\omega$. Два знака, «+» и «-», указывают на то, что электрон может и испускать, и поглощать квант энергии $E_m^0 - E_s^0 = \hbar\omega$. Этот процесс, конечно, согласуется с опытом.

Эти результаты легко могут быть описаны при помощи переходов, разобранных в п. 9. Как и в п. 9, мы говорим, что из-за присутствия возмущающего потенциала система начинает флуктуировать во всех возможных направлениях. Однако при периодически изменяющемся возмущении условием для одностороннего перехода является не сохранение энергии исходной системы, а условие Эйнштейна $E_m^0 - E_s^0 = \pm \hbar\omega$. Если бы мы хотели продолжить нашу биологическую аналогию, то могли бы сказать, что замена возмущения, постоянного по времени, на возмущение, изменяющееся со временем, соответствует изменению окружающей организм среды, которое благоприятствует выживанию различного рода видов. Однако мы еще раз предостерегаем, что эта аналогия имеет ограниченную ценность. Существенно отметить, что в обоих случаях система, которая хотя и не выживает бесконечно долго, может все же приводить к значительным физическим эффектам. Другими словами, «виртуальные» переходы не следует считать «нереальными».

15. Квазиклассическое описание поля излучения. При приближенной трактовке, которой мы здесь только что пользовались, не сразу очевидно, почему световой пучок с угловой частотой ω должен всегда передавать атому энергию, точно равную $\hbar\omega$. Это обстоятельство становится вполне ясным, только если учесть квантование и самого электромагнитного поля (см., например, [14], гл. 14). Тогда можно описать процесс поглощения фотона не только как переход электрона с m -го на n -й уровень, но так же как переход осцилляторов излучения в энергетическое состояние, которое на величину $\hbar\omega$ ниже своего первоначального состояния. Таким образом, суммарная энергия электрона и осцилляторов поля излучения сохраняется во всех процессах, которые существуют долгое время.

В настоящей трактовке мы принимали, что векторный потенциал — это число, которое может быть определено с произвольно высокой точностью в каждой точке пространства и времени при помощи классических уравнений Максвелла (см. гл. 1, п. 3), в то время как поведение электрона квантуется. При более строгой трактовке необходимо квантовать также и электромагнитное поле. Точно так же, как импульс частицы p заменяется оператором, векторный потен-

циал A тоже должен быть заменен оператором. Мы должны также добавить гамильтониан поля излучения к полному гамильтониану системы. Такая программа действий может быть реализована, если рассматривать электромагнитные поля как совокупность гармонических осцилляторов по одному для каждого волнового вектора $\mathbf{p}$ и направления поляризации μ , как это рассматривалось в гл. 1. Каждый осциллятор должен квантоваться тем же способом, как это делалось для гармонических осцилляторов вещества. Тогда можно сказать, что если осциллятор находится в N -м возбужденном состоянии, то в электромагнитном поле имеется N соответствующих фотонов. Согласно принципу соответствия, если имеется много фотонов, то электромагнитное поле можно приближенно описать как классическую систему. Это в точности соответствует тому, что мы делали до сих пор в нашей теории. Поэтому настоящая трактовка является строгой, только когда поле излучения находится в состоянии высокого возбуждения (т. е. в нем содержится много фотонов). Однако результаты, выведенные таким образом, оказались вполне правильными даже в случае, когда имеется только один фотон. Это удачное совпадение связано с тем, что трактовку задачи гармонического осциллятора в рамках принципа соответствия можно экстраполировать вплоть до малых квантовых чисел. В этой книге мы ограничимся классической трактовкой поля излучения, помня, что это является полностью законным только для излучения большой интенсивности.

16. Вычисление вероятности перехода. Теперь уже можно приступить к вычислению вероятности $|C_m|^2$ того, что система находится в m -м состоянии. Согласно уравнению (18.28),

$$|C_m|^2 = |G_{ms}F(\omega) + G_{sm}^*F(-\omega)|^2. \quad (18.33)$$

Мы будем интересоваться только длительными процессами переходов, которые только и могут привести к большим $|C_m|^2$ при малых G_{ms} . Это означает, что мы должны иметь либо $E_m^0 - E_s^0 = \hbar\omega$, либо $E_m^0 - E_s^0 = -\hbar\omega$. Первый случай соответствует поглощению энергии от поля излучения, а второй — испусканию энергии в возмущающем поле. Рассмотрим сначала первый случай. Здесь спустя большой промежуток времени большим будет тот член, который содержит выражение $[F(\omega)F^*(\omega)]$. Члены, содержащие $F(-\omega)$, будут колебаться и дадут лишь малые поправки, которыми можно пренебречь. Поэтому приближенно будем иметь

$$|C_m|^2 \cong |G_{ms}|^2 |F(\omega)|^2.$$

Подставляя $F(\omega)$ из уравнения (18.29), получим

$$|C_m|^2 = 4 \frac{|G_{ms}|^2 \sin^2 \left[(E_m^0 - E_s^0 - \hbar\omega) \frac{(t - t_0)}{2\hbar} \right]}{(E_m^0 - E_s^0 - \hbar\omega)^2}. \quad (18.34)$$

17. Связь между векторным потенциалом и интенсивностью излучения. Часто бывает удобнее выразить вероятность (18.34) через интенсивность света. Из уравнения (18.31a) получаем

$$|G_{ms}|^2 = \frac{e^2}{m^2 c^2} |A_0|^2 |\alpha_{ms}|^2.$$

Найдем величину $|A_0|^2$, воспользовавшись тем, что интенсивность излучения, т. е. поток энергии через единицу площади за единицу времени, выражается вектором Пойнтинга

$$\mathbf{I} = \frac{c}{4\pi} [\mathcal{E} \mathcal{H}],$$

где $\mathcal{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ и $\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A}^*$). Так как

$$\mathbf{A} = A_0 e^{i(\mathbf{kx} - \omega t)} + A_0^* e^{-i(\mathbf{kx} - \omega t)},$$

то получаем

$$\mathcal{E} = \frac{i\omega}{c} [A_0 e^{i(\mathbf{kx} - \omega t)} - A_0^* e^{-i(\mathbf{kx} - \omega t)}].$$

В пустом пространстве $|\mathcal{E}| = |\mathcal{H}|$ и вектор $\mathcal{E}$ нормален к $\mathcal{H}$. Поэтому $[\mathcal{E} \mathcal{H}]$, вектор в направлении распространения $\mathbf{k}$, имеет величину $|\mathcal{E}|^2$. Для интенсивности получаем

$$\frac{2\omega^2}{c} \frac{|A_0|^2}{4\pi} - \frac{\omega^2}{4\pi c} [A_0^2 e^{2i(\mathbf{kx} - \omega t)} - (A_0^*)^2 e^{-2i(\mathbf{kx} - \omega t)}].$$

Последние члены осциллирующие и поэтому при усреднении дают нуль. Тогда средняя по времени интенсивность равна

$$I = \frac{\omega^2}{2\pi c} |A_0|^2,$$

так что получаем

$$|A_0|^2 = \frac{2\pi c}{\omega^2} I. \quad (18.35)$$

Вероятность перехода (уравнение (18.34)) при этом становится равной

$$P = \frac{8\pi e^2}{m^2 c \omega^2} \frac{I |\alpha_{ms}|^2}{(E_m^0 - E_s^0 - \omega \hbar)^2} \sin^2 \left[\left(\frac{E_m^0 - E_s^0 - \omega \hbar}{2\hbar} \right) (t - t_0) \right]. \quad (18.36)$$

18. Влияние распределения частот падающего света. Уравнение (18.36) дает вероятность того, что свет данной угловой частоты ω вызывает переход за время $t - t_0$. Для времен настолько малых, что $(E_m - E_n - \hbar\omega)(t - t_0)/2\hbar \ll 1$, эта вероятность возрастает, как $(t - t_0)^2$. Последнее можно видеть, разлагая синусоидальную функцию

*) Для вакуума принимается $\varphi = 0$. Справедливость этого предположения доказывается в гл. 1, п. 14.

в ряд и ограничиваясь только первым членом разложения. Следовательно, если частота точно определена, то вероятность не возрастает линейно со временем, как можно было ожидать с первого взгляда, а возрастает квадратично. Более того, точно так же, как и в случае возмущения, постоянного во времени, вероятность, очевидно, колеблется между нулем и некоторым максимальным значением. Однако аналогичный результат был уже получен в гл. 2, п. 16 в связи с классической теорией поглощения энергии излучения атомом. Там было показано, что если принять во внимание действительное распределение падающего излучения по конечной области частот, то величина поглощенной энергии, оказывается, растет пропорционально первой степени времени облучения. Подобно этому и при квантовой трактовке мы должны интегрировать вероятность перехода по некоторой области частот.

Уравнение (18.34) справедливо для света определенной частоты. Если пучок света содержит много различных частот, то уравнение (18.31a) предполагает, что доли от различных частот нужно сначала сложить, чтобы получить результирующий векторный потенциал

$$\mathbf{A}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{A}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega, \text{ а затем уже следует вычислять величины } \alpha_{ms}$$

при помощи этого потенциала. В общем случае различные частоты будут интерферировать, и эта интерференция создаст импульсы излучения (см., например, гл. 3, п. 16). С другой стороны, если между соседними $\mathbf{A}(\omega)$ нет простого фазового соотношения, то мы получим не импульсы, а нечто напоминающее случайные шумы в радиоволнах. Если имеет место этот случай, то интерференционные члены для различных $\mathbf{A}(\omega)$ в выражении для $|G_{ms}|^2$ будут при усреднении обращаться в нуль. Тогда можно будет вычислить $|C_m|^2$, суммируя отдельные доли от каждой частоты (с помощью уравнения (18.36)), и таким образом достигнуть большего упрощения расчета.

В реальном световом пучке излучение получается от атомов, которые в среднем значительно удалены друг от друга по сравнению с длиной волны, но которые часто сталкиваются с другими атомами. Поэтому колебания каждого атома имеют хаотическое фазовое соотношение с колебаниями других атомов. Кроме того, атомы движутся с различными скоростями и потому дают различные величины доплеровского смещения. Это означает, что каждая различная частота имеет фазу, по существу не связанную с фазой других частот. Следовательно, в типичном световом пучке можно не обращать внимания на фазовые соотношения между членами с различными частотами и просто суммировать вероятности, получающиеся от каждой частоты в отдельности, как и предполагалось в предыдущем пункте.

Чтобы провести это суммирование, заменим сначала интенсивность I в уравнении (18.36), которая относится к определенной частоте, на

$I(\nu)d\nu$ — интенсивность интервала частот между ν и $\nu + d\nu$, а затем проинтегрируем по всем значениям ν . Заменяя

$$d\nu = \frac{d\omega}{2\pi},$$

мы получим для полной вероятности перехода

$$|C_m|^2 = \frac{4e^2}{m^2c} \int_0^\infty \frac{|\alpha_{ms}|^2 I(\nu)}{\omega^2 (E_m^0 - E_s^0 - \hbar\omega)^2} \sin^2 \left[\frac{(E_m^0 - E_s^0 - \hbar\omega)}{2\hbar} (t - t_0) \right] d\omega. \quad (18.37)$$

Но, как показано в гл. 2, п. 16, когда $(t - t_0)$ велико, подынтегральная величина имеет заметное значение только в узкой области вблизи $\hbar\omega = E_m^0 - E_s^0$. Поэтому можно вынести величину $|\alpha_{ms}|^2/\omega^2$ за знак интеграла и подставить значение $\omega_0 = (E_m^0 - E_s^0)/\hbar$. Оставшийся интеграл может быть вычислен методом, использованным уже в гл. 2, п. 16, и окончательно получим

$$|C_m|^2 = \frac{2\pi e^2}{m^2 c \hbar^2} I(\nu_0) |\alpha_{ms}|^2 \frac{(t - t_0)}{\omega_0^2}. \quad (18.38)$$

19. Обсуждение результатов. 1) Вероятность перехода в этом случае пропорциональна времени, но, как и в классической теории (см. гл. 2, п. 16), она велика только в узком интервале частот около $\omega = \omega_0$. Ширина этого интервала $\Delta\omega \cong 1/(t - t_0)$. Следовательно, чем дольше время наблюдения, тем ближе должна быть частота ω к значению ω_0 , чтобы можно было получить большую вероятность перехода.

На практике поглощение редко измеряется быстрее чем за 10^{-7} сек, а нормально такое измерение занимает значительно большее время. Так как свет имеет угловую частоту порядка 10^{16} сек $^{-1}$, то ясно, что интервал частот, который вносит существенный вклад при резко определенном уровне атома, имеет величину порядка процента от 10^9 . Этот эффект слишком мал, чтобы его можно было измерить, так как естественная ширина самого энергетического уровня больше этого интервала (см. гл. 10, п. 34, рассмотрение естественной ширины).

2) Для справедливости уравнения (18.38) необходимо выполнение двух предположений. Во-первых, интервал времени $(t - t_0)$ должен быть достаточно малым, чтобы величина $|C_m|^2$ не была близка к единице; в противном случае теория возмущений становится неприменимой. Во-вторых, интервал $(t - t_0)$ должен быть достаточно велик, а именно настолько, чтобы выражение

$$\frac{\sin^2 \left[\frac{(E_m^0 - E_s^0 - \hbar\omega)}{2\hbar} (t - t_0) \right]}{(E_m^0 - E_s^0 - \hbar\omega)^2},$$

как функция ω , было достаточно малым всюду, за исключением очень узкой области частот вблизи $\omega = (E_m^0 - E_s^0)/\hbar$. Это условие используется в уравнении (18.37) для того, чтобы в нем можно было вынести часть подынтегральной функции из-под знака интеграла. Единственный способ удовлетворить одновременно этим обоим требованиям — это сделать малой величину $|G_{ms}|^2$, другими словами, иметь дело со слабым возмущением.

3) Величина вероятности перехода зависит от матричного элемента G_{ms} . Таким образом, вычисление G_{ms} является важным этапом при определении вероятностей перехода.

20. Индуцированное испускание квантов. В уравнении (18.33) было показано, что односторонние переходы могут осуществляться не только когда $E_m^0 - E_s^0 = \hbar\omega$, но также при $E_m^0 - E_s^0 = -\hbar\omega$. Первый случай, как мы видели, соответствует поглощению квантов; а второй должен соответствовать испусканию. Из выражения (18.31б) следует, что $|\alpha_{sm}|^2 = |\alpha_{ms}|^2$. Отсюда делается вывод из уравнения (18.33), что вероятность поглощения такая же, как вероятность испускания (см. п. 10, пример микроскопической обратимости). Поэтому, если атом находится в таком состоянии, когда он может терять энергию $\hbar\omega$, переходя с возбужденного уровня на более низкий энергетический уровень, то это будет совершаться с вероятностью, пропорциональной интенсивности существующего уже излучения. Этот эффект известен как «индуцированное» или вынужденное излучение.

21. Классическая аналогия индуцированного излучения. Индуцированное излучение встречалось уже и в классической теории. В электрическом поле $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t - \varphi)$, где φ — произвольный фазовый угол, скорость, с которой движущийся заряд поглощает энергию, равна

$$\frac{dW}{dt} = e\mathcal{E}v = e(\mathcal{E}_0 v) \cos(\omega t - \varphi),$$

где v — скорость заряда. Для увеличения количества поглощаемой энергии необходимо, чтобы электрическое поле колебалось с частотой, находящейся в резонансе с частотой движущегося заряда. Следовательно, $v = v_0 \cos \omega t$, что дает

$$\begin{aligned} \frac{dW}{dt} &= (ev_0 \mathcal{E}_0) \cos(\omega t - \varphi) \cos \omega t = \\ &= \frac{e\mathcal{E}_0 v_0}{2} [\cos \varphi (1 + \cos 2\omega t) + \sin \varphi \sin 2\omega t]. \end{aligned}$$

Последние два члена, усредненные за период, равны нулю. Таким образом, средняя скорость поглощения энергии зависит только от φ — угла между фазами колеблющегося поля излучения и колеблю-

щегося электрона. При $\varphi = 0$ $\frac{dW}{dt}$ максимально. Для фаз между $-\frac{\pi}{2}$ и $\frac{\pi}{2}$ $\frac{dW}{dt}$ — положительная величина, для всех других — отрицательная. Другими словами, если свет будет отличаться по фазе от движения электрона на 180° , то электрон теряет энергию в пользу электромагнитного поля со скоростью, пропорциональной $e\mathcal{E}_0 v$. Следовательно, мы имеем индуцированное излучение. Так как мы принимаем, что падающая световая волна включает в себе более или менее хаотически распределенные фазы, то будут моменты, когда фаза будет такова, что энергия поглощается электроном, а в некоторые другие моменты он будет испускать энергию. Таким образом, будет иметь место и поглощение, и индуцированное испускание.

22. Самопроизвольное излучение. Изложенная теория не учитывает хорошо известного факта, что движущийся с ускорением электрон должен излучать, даже если на него не падает свет. Этот процесс называется «самопроизвольным излучением». В данной теории этот процесс не предсказывается, поскольку в ней не принималось во внимание, что для поля излучения существует функция Гамильтона и это поле может поглощать энергию, точно так же как и частица вещества. Если это учесть, то и классическая теория предсказывает правильную величину самопроизвольного излучения. То же самое относится и к квантовой теории (см., например, [14], гл. 14).

23. Трактровка самопроизвольного излучения по Эйнштейну. Вероятность самопроизвольного испускания квантов возбужденными атомами можно строго вычислить, лишь квантуя электромагнитное поле. Здесь, однако, мы дадим более раннюю трактовку этого явления, развитую Эйнштейном, который получил искомую вероятность, рассматривая термодинамическое равновесие с окружающими атомами, находящимися при некоторой температуре T . Суть этого рассмотрения следующая: когда система находится в термодинамическом равновесии, то атомы должны быть в стационарном состоянии, в котором вероятность P_{mn} перехода из m -го в n -е состояние с испусканием кванта компенсируется вероятностью P_{nm} перехода из n -го в m -е состояние с поглощением кванта. Согласно уравнению (18.38), вероятность поглощения равна

$$P_{nm} = 2\pi |\alpha_{nm}|^2 \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \frac{c}{\omega^2 \hbar^2} I(\nu) p_n = A_{nm} I(\nu) p_n,$$

где p_n — вероятность того, что атом находится в n -м состоянии. (Это уравнение определяет величину A_{nm} . Заметим, что $A_{nm} = A_{mn}$.)

Вероятность излучения составляется из двух частей, каждая из которых пропорциональна p_m — вероятности того, что атом находится в m -м состоянии. Первая из них — вероятность индуцированного излучения

$$P_{mn} = A_{nm} I(\nu) p_m.$$

Вторая — вероятность самопроизвольного излучения, которую обозначим через $B_{mn}p_m$. Последняя не зависит от интенсивности $I(\nu)$.

Условие статистического равновесия гласит:

$$p_n A_{mn} I(\nu) = p_m [B_{mn} + A_{mn} I(\nu)],$$

или

$$\frac{p_m}{p_n} = \frac{A_{mn} I(\nu)}{B_{mn} + A_{mn} I(\nu)}. \quad (18.39)$$

Нам также известно, что в статистическом равновесии различные квантовые состояния атомов подчиняются максвелловскому распределению*), или

$$\frac{p_m}{p_n} = \frac{e^{-E_m/kT}}{e^{-E_n/kT}} = e^{(E_n - E_m)/kT} = e^{-h\nu/kT}. \quad (18.40)$$

Таким образом, получаем

$$e^{-h\nu/kT} = \frac{A_{mn} I(\nu)}{B_{mn} + A_{mn} I(\nu)}, \quad \text{или} \quad \frac{B_{mn}}{A_{mn}} = I(\nu) (e^{h\nu/kT} - 1). \quad (18.41)$$

Выражение для интенсивности $I(\nu)$ может быть получено независимо из уравнений (1.31) и (1.32), которые дают плотность излучения абсолютно черного тела при тепловом равновесии:

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

Если излучение изотропно, то можно легко показать, что интенсивность излучения, имеющего данную поляризацию в единице телесного угла, равна

$$I(\nu) = \frac{c\rho(\nu)}{8\pi} = \frac{h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}. \quad (18.42)$$

Задача 1. Доказать эту формулу.

Подстановка выражения для $I(\nu)$ в уравнение (18.41) дает

$$\frac{B_{mn}}{A_{mn}} = \frac{h\nu^3}{c^2}.$$

Таким образом, мы видим, что вероятность самопроизвольного излучения пропорциональна вероятности поглощения. Точнее получаем

$$B_{mn} = 2\pi |\alpha_{mn}|^2 \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \frac{h\nu^3}{c\hbar^2\omega^2}. \quad (18.43)$$

24. Применения теории переходов. Теперь мы можем применить развитую теорию к различным конкретным системам. Прежде чем

*) Показано, что атомы подчиняются статистике Максвелла — Больцмана [15].

приступить к этому, необходимо вычислить матричные элементы α_{mn} (см. уравнение (18.316)). Заметим, что α_{mn} зависят от формы возмущающего потенциала (который в рассмотренном случае принимался в виде плоской волны) и одинаково от волновых функций начального и конечного состояний. Это типично квантовомеханическая черта. В классической теории мы не должны были бы ожидать зависимости скорости процессов перехода от того, что произойдет с частицей после того, как она совершит переход из одного состояния в другое. Однако в квантовой теории процесс перехода квантуется и предполагается, что во время перехода из одного состояния в другое электрон находится одновременно в обоих состояниях с вероятностью, которая изменяется со временем таким образом, что вероятность нахождения в конечном состоянии неуклонно возрастает. Таким образом, появление волновой функции конечного состояния в формуле для вероятности перехода отражает квантовый характер процесса перехода.

Интеграл, который следует вычислить, имеет вид

$$\alpha_{mn} = \int U_m^*(p_z e^{ikx}) U_n dx = \frac{\hbar}{i} \int U_m^* e^{ikx} \frac{\partial U_n}{\partial z} dx. \quad (18.44)$$

Этот интеграл можно вычислить приближенно, если учесть, что $kx = 2\pi/\lambda$, где λ — длина световой волны. Множитель $U_m(x)$ и $U_n(x)$ — волновые функции, которые велики только в области порядка размеров атома $\sim 3 \cdot 10^{-8}$ см. С другой стороны, длины световых волн порядка $\sim 6 \cdot 10^{-5}$ см. Поэтому экспоненциальная функция может быть разложена в степенной ряд:

$$e^{ikx} = e^{ikx_0} \left[1 + ik(x - x_0) - \frac{k^2}{2}(x - x_0)^2 + \dots \right],$$

где x_0 — координата центра атома. Если интеграл от первого члена разложения не исчезает, то экспоненциальную функцию с очень малой ошибкой можно заменить на e^{ikx_0} , поскольку $k(x - x_0)$ очень мало в области, где U_m и U_n велики (сравните эту трактовку с гл. 2, п. 16). Влияние членов ряда более высоких порядков будет разобрано позже в связи с запрещенными переходами.

Тогда матричный элемент упрощается и принимает вид

$$\alpha_{mn} \cong \frac{\hbar}{i} e^{ikx_0} \int U_m^* \frac{\partial U_n}{\partial z} dx. \quad (18.45)$$

25. Приближение электрического диполя. Покажем теперь, что приближение, в котором пренебрегают членами, начиная с $k(x - x_0)$, в разложении экспоненциальной функции, эквивалентно замене атома эффективным электрическим диполем с моментом, равным моменту действительного заряда, взятого относительно центра атома.

Для этого сначала воспользуемся важным свойством функции U_m .

Предположим, что $\psi_m(x, t) = U_m(x) e^{-iE_m^0 t/\hbar}$ — решение уравнения Шрёдингера для невозмущенной системы, т. е. в отсутствие световой волны. Тогда можно показать, что

$$\frac{d}{dt} \int \psi_m^* z \psi_n d\mathbf{x} = \frac{\hbar}{im} \int \psi_m^* \frac{\partial}{\partial z} \psi_n d\mathbf{x}. \quad (18.46)$$

Это следует из соотношений

$$\frac{d}{dt} \int \psi_m^* z \psi_n d\mathbf{x} = \int \left(\frac{\partial \psi_m^*}{\partial t} z \psi_n + \psi_m^* z \frac{\partial \psi_n}{\partial t} \right) d\mathbf{x}$$

и

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = H_0 \psi_n, \quad -i\hbar \frac{\partial \psi_m^*}{\partial t} = H_0^* \psi_m^*$$

с

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}).$$

Пользуясь эрмитовостью оператора H_0 , читатель может легко проверить справедливость уравнения (18.46).

Задача 2. Доказать уравнение (18.46) указанным выше способом. Показать также, что оно следует из выражения (16.49), если учесть, что $\int \psi_m^* z \psi_n d\mathbf{x}$ есть матричный элемент z в гейзенберговском представлении.

Подставим теперь в уравнение (18.46) следующее решение уравнения Шрёдингера для невозмущенной системы: $\psi_m = U_m e^{-iE_m^0 t/\hbar}$. В результате получим

$$\frac{d}{dt} \left[e^{i(E_m^0 - E_n^0)t/\hbar} \right] \int U_m^* z U_n d\mathbf{x} = e^{i(E_m^0 - E_n^0)t/\hbar} \int U_m^* \frac{\hbar}{im} \frac{\partial}{\partial z} U_n d\mathbf{x}.$$

Заменив $(E_m^0 - E_n^0) = \hbar \omega_{mn}$, окончательно получим

$$\frac{\hbar}{im} \int U_m^* \frac{\partial}{\partial z} U_n d\mathbf{x} = i\omega_{mn} \int U_m^* z U_n d\mathbf{x}.$$

Интеграл в правой части есть своего рода среднее значение координаты z , вычисленное с помощью функции вероятности $U_m^* U_n$, которая включает как начальное, так и конечное состояния. В какой-то мере он аналогичен моменту диполя*), за исключением того, что здесь включены оба состояния одновременно. Это выражение иногда называют «дипольным моментом между m -м и n -м состояниями».

*) Так как электрический диполь с моментом $M = ez$ привел бы к тем же матричным элементам, то, следовательно, приближение (18.45), в котором пренебрегается членом $k(x - x_0)$, эквивалентно замене действительного заряда таким диполем.

Его обозначают через

$$z_{mn} = \int U_m^* z U_n d\mathbf{x}. \quad (18.47)$$

Тогда можно записать

$$\alpha_{mn} = i\omega_{mn} m z_{mn}. \quad (18.48)$$

Вероятность поглощения излучения, которое падает в направлении оси x и поляризовано в направлении оси z , дается тогда уравнением (18.38):

$$P = 2\pi \left(\frac{e}{c\hbar} \right)^2 cI(\nu) |z_{nm}|^2. \quad (18.49)$$

Вероятность самопроизвольного испускания излучения, поляризованного в направлении оси z , в элементе телесного угла $d\Omega$ в направлении оси x дается уравнением (18.43):

$$R d\Omega = 8\pi^3 \left(\frac{e}{c} \right)^2 \frac{\nu^3}{c\hbar} |z_{nm}|^2 d\Omega.$$

Если мы хотим получить вероятность излучения в каком-либо другом направлении и с другой поляризацией, то тогда необходимо просто заметить, что все рассуждение будет таким же, если мы первоначально выберем в уравнении (18.30) плоскую волну, идущую в произвольном направлении с произвольной поляризацией. В конечном результате пришлось бы только заменить $|z_{nm}|^2$ на $|\xi_{nm}|^2$, где ξ — координата частицы, взятая в направлении поляризации волны. Таким образом, можно написать

$$R = 8\pi^3 \left(\frac{e}{c} \right)^2 \frac{\nu^3}{c\hbar} |\xi_{nm}|^2. \quad (18.50)$$

Если α , β и γ — углы направления поляризации соответственно относительно осей x , y и z , то можно написать

$$\xi = x \cos \alpha + y \cos \beta + z \cos \gamma$$

и

$$R = 8\pi^3 \left(\frac{e}{c} \right)^2 \frac{\nu^3}{c\hbar} |(x \cos \alpha + y \cos \beta + z \cos \gamma)_{mn}|^2. \quad (18.51)$$

Для наглядной иллюстрации этих углов рассмотрим рис. 76. Линия OP соответствует направлению распространения, которое составляет угол A с осью z и проекция которого на плоскость xu составляет угол B с осью x . Такая волна может быть разложена на волны, имеющие одно из двух направлений поляризации. Поэтому достаточно рассмотреть по отдельности волны, которые поляризованы в плоскости OPz и нормально к ней. Если волны поляризованы в плоскости OPz , то ξ дается формулой

$$\xi = -x \cos B \cos A - y \sin B \cos A + z \sin A. \quad (18.52)$$

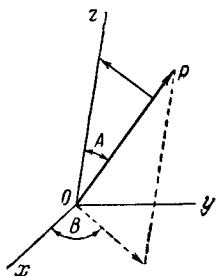


Рис. 76.

Если же они поляризованы нормально к плоскости OPz , то

$$\xi = x \sin B - y \cos B. \quad (18.53)$$

26. Вычисление величин α_{mn} для изотропного гармонического осциллятора. Рассмотрим теперь изотропный трехмерный гармонический осциллятор. Для удобства рассмотрим волну, распространяющуюся в направлении оси x и поляризованную в направлении оси z . Вычислим z_{mn} . Согласно уравнению (18.47), это выражение точно равно

$$z_{mn} = \int U_m^* z U_n dx,$$

где U_m и U_n — нормированные собственные функции, принадлежащие различным собственным состояниям. В этом случае они являются собственными функциями для трехмерного гармонического осциллятора (см. выражение (15.40)).

Собственные функции более подробно можно записать так:

$$U_m = \psi_{m_x} \psi_{m_y} \psi_{m_z} \quad \text{и} \quad U_n = \psi_{n_x} \psi_{n_y} \psi_{n_z},$$

где ψ_{m_x} — собственная функция гармонического осциллятора в направлении оси x в состоянии m_x и т. д. Величина интеграла определяется легче всего при помощи уравнений (13.38) и (13.39). Сначала мы подставляем $z = \sqrt{\hbar/m\omega} q$ (см. уравнения (13.2) и (13.3)), тогда

$$z = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[\left(\frac{\partial}{\partial q} + q \right) - \left(\frac{\partial}{\partial q} - q \right) \right]. \quad (18.54)$$

Согласно уравнениям (13.38) и (13.39),

$$\left(\frac{\partial}{\partial q} - q \right) \psi_{n_z} = \sqrt{2(n_z + 1)} \psi_{(n_z + 1)} \quad \text{и} \quad \left(\frac{\partial}{\partial q} + q \right) \psi_{n_z} = \sqrt{2n_z} \psi_{(n_z - 1)}.$$

Следовательно,

$$z_{mn} = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int \int \int dx dy dz \psi_{m_x}^* \psi_{n_x} \psi_{m_y}^* \psi_{n_y} \psi_{m_z}^* \times \\ \times (\sqrt{n_z + 1} \psi_{(n_z + 1)} - \sqrt{n_z} \psi_{(n_z - 1)}). \quad (18.55)$$

В силу ортогональности функций ψ , $z_{mn} = 0$ для всех случаев, кроме $m_x = n_x$ и $m_y = n_y$. Поэтому при переходах под действием света, поляризованного только в направлении оси z , не происходит никакого изменения в состоянии колебаний в направлении x и y . Если $m_x = n_x$ и $m_y = n_y$, то интегралы по x и y равны единице вследствие предположения, что функции ψ нормированы.

Что касается интегралов по z , то они все равны нулю, если только не выполнены условия

$$m_z = n_z + 1 \quad \text{или} \quad m_z = n_z - 1. \quad (18.56)$$

Другими словами, переходы могут иметь место только в тех состояниях, для которых z -компонента колебаний переходит или в соседнее высшее, или в соседнее низшее состояние. В последних двух случаях интеграл по z равен единице, поэтому

$$z_{mn} = \left\{ \begin{array}{l} -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n_z + 1}, \text{ если } m_z = n_z + 1 \text{ (поглощение),} \\ +\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n_z}, \text{ если } m_z = n_z - 1 \text{ (излучение).} \end{array} \right\} \quad (18.57)$$

Первый из этих случаев соответствует поглощению фотона, так как энергия атома возрастает в результате перехода, а второй — испусканию, так как энергия атома убывает.

Средняя вероятность самопроизвольного испускания квантов в единичном телесном угле в направлении нормали к z получается, если подставить полученные результаты в уравнение (18.51):

$$R = \frac{\pi}{m} \left(\frac{e}{c} \right)^2 \frac{\nu^2}{c} n_z. \quad (18.58)$$

Заметим, что вероятность поглощения, так же как и вероятность испускания, возрастает с ростом возбуждения осциллятора. В основном состоянии ($n_z = 0$), конечно, испускание отсутствует, но уже существует определенная возможность поглощения.

27. Правила отбора для гармонического осциллятора. Мы выше видели, что $z_{mn} = 0$ для большинства переходов (например, когда $m_z = n_z + 2$). Это означает, что по крайней мере в дипольном приближении, которым мы пользовались, другие переходы не могут происходить. В иной терминологии это «запрещенные» переходы. В пп. 34 и 35 мы увидим, что если принять во внимание члены высшего порядка малости в разложении $e^{ik(z-z_0)}$ (см. уравнение (18.44)), то такие переходы могут происходить, но с гораздо меньшей вероятностью, чем «разрешенные» переходы. Поэтому их вернее было бы называть «маловероятными» переходами, так как они не полностью запрещены.

Правила $m_z = n_z + 1$ или $m_z = n_z - 1$, которые определяют разрешенные переходы, обычно называют *правилами отбора*. Можно привести много примеров таких правил.

28. Связь правил отбора с принципом соответствия. В классическом дипольном приближении орбита электрона предполагается настолько малой по сравнению с длиной волны, что колеблющийся электрон действует как колебательный диполь ничтожно малых размеров, когда речь идет об испускании излучения. Если бы этот диполь совершал простое гармоническое колебание с угловой частотой ω , то он должен был бы излучать и поглощать только свет

той же частоты. Квантовомеханические вероятности перехода должны привести к тем же результатам в классическом пределе. Но квантовомеханически $\pm \hbar\omega = E_m - E_n$ (знак « $\pm$ » указывает на возможность испускания и поглощения). Так как $E_{n_z} = (n_z + \frac{1}{2})\hbar$, то мы получим правильную классическую частоту в классическом пределе, только если на все переходы наложено ограничение $m_z - n_z = \pm 1$. Но это как раз то самое ограничение, которое было получено квантовомеханически в уравнении (18.57). Следовательно, наши правила отбора гарантируют правильную классическую частоту в классическом пределе. Если бы этого не было, то любая частота, кратная указанной классической, излучалась бы при переходах, в которых m_z изменялось бы больше чем на единицу. До разработки современной квантовой теории существование правил отбора фактически подразумевалось в требовании, чтобы испускаемые частоты совпадали с классической частотой в соответствующем пределе больших квантовых чисел. Позже мы еще вернемся к этому вопросу.

29. Введение четности. Удобно, особенно для сложных систем, содержащих много частиц, ввести классификацию волновых функций по свойству, называемому «четностью». Четность волновой функции зависит от того, будет ли она менять свой знак, если значения всех координат каждой частицы заменить отрицательными значениями. Для исследования эффекта четности надо положить таким образом:

$$\psi(-x_1, -y_1, -z_1; -x_2, -y_2, -z_2; -x_3, -y_3, -z_3; \dots),$$

где x_1, y_1, z_1 — координаты первой частицы и т. д. Это можно сокращенно записать в виде $\psi(-\mathbf{x}_i)$, где $\mathbf{x}_i$ — вектор, определяющий положение i -й частицы. В общем случае нет специального соотношения между $\psi(\mathbf{x}_i)$ и $\psi(-\mathbf{x}_i)$. Однако для системы, в которой потенциальная функция $V(\mathbf{x}_i)$ не изменяется при замене $\mathbf{x}_i$ на $-\mathbf{x}_i$ (т. е. когда $V(\mathbf{x}_i) = V(-\mathbf{x}_i)$), можно показать, что все собственные состояния можно сгруппировать по тому признаку, каким из двух следующих свойств они обладают:

$$\psi(\mathbf{x}_i) = \psi(-\mathbf{x}_i) \quad \text{или} \quad \psi(\mathbf{x}_i) = -\psi(-\mathbf{x}_i). \quad (18.59)$$

Говорят, что первый тип обладает свойством четности, а второй — нечетности.

Для доказательства возможности этой классификации рассмотрим невырожденную собственную функцию гамильтониана $H\psi_E = E\psi_E$. Кинетическая энергия не изменяется, если $\mathbf{x}_i$ заменить на $-\mathbf{x}_i$. Так как мы предположили, что V тоже не изменяется при такой операции, то ясно, что H не изменяется в любом случае. Заменяя $\mathbf{x}_i$ на $-\mathbf{x}_i$ в написанном выше выражении, получаем

$$H\psi_E(-\mathbf{x}_i) = E\psi_E(-\mathbf{x}_i). \quad (18.60)$$

Следовательно, если $\psi_E(\mathbf{x}_i)$ — собственная функция с энергией E , то таковой же будет $\psi_E(-\mathbf{x}_i)$. Но если энергетический уровень не вырожден, то существует только одна такая собственная функция. Это означает, что $\psi_E(-\mathbf{x}_i) = C\psi_E(\mathbf{x}_i)$, где C — какая-то постоянная величина. Для определения C заменим опять $\mathbf{x}_i$ на $-\mathbf{x}_i$ в уравнении $\psi_E(-\mathbf{x}_i) = C\psi_E(\mathbf{x}_i)$, получаем $\psi_E(\mathbf{x}_i) = C\psi_E(-\mathbf{x}_i) = C^2\psi_E(\mathbf{x}_i)$. Таким образом, $C^2 = 1$ и $C = \pm 1$. Следовательно, каждая невырожденная собственная функция H должна обладать или свойством $\psi_E(-\mathbf{x}_i) = \psi_E(\mathbf{x}_i)$, или $\psi_E(-\mathbf{x}_i) = -\psi_E(\mathbf{x}_i)$. Однако следует заметить, что эти свойства требуются, только когда $H(\mathbf{x}_i) = H(-\mathbf{x}_i)$.

Если энергетические уровни вырождены, то приводимые рассуждения не обязательно выполняются. Однако можно показать, что и тогда всегда возможно классифицировать состояния по их четности, но мы здесь этого делать не будем.

Примеры. Для одной частицы с радиально симметричным потенциалом $V(\mathbf{x}_i) = V(-\mathbf{x}_i)$, поэтому каждое собственное состояние должно иметь определенную четность. Согласно уравнению (15.1), собственные функции имеют вид $f_{l,n}(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$, где l — квантовое число полного момента количества движения, а m — магнитное квантовое число. Так как r по определению положительная величина, то член $f_{l,n}(r)$ не изменяется при замене $\mathbf{x}$ на $-\mathbf{x}$. Однако член $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ может как изменить, так и не изменить знак. Например, $P_1(\cos \vartheta) = P_1(z/r) = z/r$ изменяет знак, если заменить z на $-z$. Однако $P_2(\cos \vartheta) = \left(\frac{3z^2}{r^2} - 1\right)$ не изменяет знака. Можно показать, что функция $P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$ нечетна при нечетных l и четна при четных l .

Задача 3. Доказать последнее утверждение.

Четность полезна как способ классификации состояний, так как это понятие применимо также и в случае многих частиц, и в случае потенциала, не обладающего сферической симметрией. Например, в симметричной двухатомной молекуле потенциал не изменяется, если $\mathbf{x}_i$ заменить на $-\mathbf{x}_i$, при условии, что $\mathbf{x}_i$ отсчитывается от центра молекулы. Четность продолжает оставаться истинно квантовым свойством, а момент количества движения уже не является таковым, потому что гамильтониан этой системы молекул не обладает сферической симметрией.

30. Правила отбора для четности. Рассмотрим матричный элемент возмущающего потенциала $V(\mathbf{x}_i)$:

$$\int \psi_m^*(\mathbf{x}_i) V(\mathbf{x}_i) \psi_n(\mathbf{x}_i) d\mathbf{x}_i.$$

Так как интегрирование проводится по всем $\mathbf{x}_i$, то он не должен изменяться, если все $\mathbf{x}_i$ заменить на $-\mathbf{x}_i$:

$$\int \psi_m^*(\mathbf{x}_i) V(\mathbf{x}_i) \psi_n(\mathbf{x}_i) d\mathbf{x}_i = \int \psi_m^*(-\mathbf{x}_i) V(-\mathbf{x}_i) \psi_n(-\mathbf{x}_i) d\mathbf{x}_i. \quad (18.61)$$

Предположим теперь, что V обладает свойством $V(\mathbf{x}_i) = V(-\mathbf{x}_i)$ и что ψ_m и ψ_n имеют определенную четность. Если ψ_m и ψ_n имеют одинаковый тип четности, то соотношение (18.61) становится тождеством. Но если у них противоположная четность, то имеем

$$\int \psi_m^*(\mathbf{x}_i) V(\mathbf{x}_i) \psi_n(\mathbf{x}_i) d\mathbf{x}_i = - \int \psi_m^*(\mathbf{x}_i) V(\mathbf{x}_i) \psi_n(\mathbf{x}_i) d\mathbf{x}_i. \quad (18.62)$$

Но это может быть справедливо, только если интеграл равен нулю. Отсюда следует правило отбора: четный возмущающий член может обусловить переходы только между состояниями с волновыми функциями одинаковой четности.

Аналогично можно показать, что если V — нечетная функция, т. е. $V(-\mathbf{x}_i) = -V(\mathbf{x}_i)$, то она может обусловить переходы только между состояниями с различной четностью.

Задача 4. Доказать это утверждение.

Пример. В задаче с одной частицей возмущающий потенциал для излучающего диполя равен $x \cos \alpha + y \cos \beta + z \cos \gamma$ (см. уравнение (18.51)). Он очевидно обладает свойством нечетности. Следовательно, при любом дипольном переходе четность должна изменяться. Правила отбора по четности особенно важны в сложных системах, где правила отбора для момента количества движения, которые будут получены в следующих нескольких пунктах, уже больше не могут быть использованы. Кроме того, существует много систем без сферической симметрии, например кристаллическая решетка, для которых правила отбора по четности остаются справедливыми, хотя правил отбора по моментам совсем не существует.

31. Правила отбора для сферически симметричного потенциала без учета спина. Изучим теперь правила отбора для одной частицы, движущейся в поле сферически симметричного потенциала, но пренебрежем эффектами спина. Собственные функции такой системы даются уравнением (15.1).

Начнем рассмотрение со случая световой волны, распространяющейся в направлении оси x и поляризованной вдоль оси z . Для этого случая надо вычислить матричный элемент $z = r \cos \vartheta$:

$$z_{n', l', m'; n, l, m} = \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi r^2 \sin \vartheta f_{l', n'}(r) Y_{l', m'}^*(\vartheta, \varphi) r \times \\ \times \cos \vartheta f_{l, n}(r) Y_{l, m}(\vartheta, \varphi). \quad (18.63)$$

Так как $Y_{l, m}(\vartheta, \varphi) \sim P_l^m(\vartheta) e^{im\varphi}$, то ясно, что интеграл по φ включает множитель $\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi$. Этот интеграл равен нулю для всех случаев, кроме $m' = m$.

Рассмотрим теперь интегрирование по ϑ . Мы должны вычислить

$$\int_0^\pi Y_{l'}^{m'}(\cos \vartheta) \cos \vartheta Y_l^m(\cos \vartheta) d(\cos \vartheta). \quad (18.64)$$

Ограничимся сначала частным случаем $m=0$. Здесь мы имеем $Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(\cos \vartheta)$ (см. уравнение (14.526)). Из уравнения (14.526) получаем

$$\cos \vartheta P_l(\cos \vartheta) = \frac{(l+1)}{2l+1} P_{l+1}(\cos \vartheta) + \frac{l}{2l+1} P_{l-1}(\cos \vartheta). \quad (18.65)$$

Интеграл, который следует вычислить, принимает вид

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{(2l'+1)}{2} \frac{(2l+1)}{2}} \int_0^\pi P_{l'}(\cos \vartheta) \left[\frac{(l+1)}{2l+1} P_{l+1}(\cos \vartheta) + \right. \\ \left. + \frac{l}{2l+1} P_{l-1}(\cos \vartheta) \right] d(\cos \vartheta). \end{aligned} \quad (18.66)$$

Так как полиномы Лежандра ортогональны, то интеграл равен нулю для всех случаев, кроме

$$l' = l+1 \quad \text{или} \quad l' = l-1. \quad (18.67)$$

Тогда получаем

$$Z_{n', l', m'; n, l, m} =$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^\infty f_{l'n'}(r) f_{l,n}(r) r^3 dr \begin{cases} (l+1) \sqrt{\frac{2l+3}{2l+1}}, & \text{когда } l' = l+1; \\ l \sqrt{\frac{2l-1}{2l+1}}, & \text{когда } l' = l-1. \end{cases} \quad (18.68)$$

Интеграл по r в общем случае не равен нулю для любого частного выбора n или l .

Правила отбора. Таким образом, для случая $m'=m=0$ свет, поляризованный в направлении оси z , может испускаться и поглощаться, только если

$$m'=m \quad \text{и} \quad l'=l+1 \quad \text{или} \quad l'=l-1. \quad (18.69)$$

Это и есть правила отбора для этого случая.

Обобщение для случая произвольных m и m' . Подобными методами можно было бы воспользоваться для обобщения этих результатов на случай произвольных чисел m и m' , но легче использовать общий результат, который следует из уравнения (17.776), выражаю-

щего произведение двух волновых функций моментов в виде суммы собственных функций моментов. В нашем случае пишем

$$P_1(\cos \vartheta) Y_l^m(\vartheta, \varphi) = C_1 Y_{l-1}^m(\vartheta, \varphi) + C_2 Y_l^m(\vartheta, \varphi) + C_3 Y_{l+1}^m(\vartheta, \varphi).$$

Матричный элемент принимает вид

$$\int Y_{l'}^{m'*} P_1(\cos \vartheta) Y_l^m d\Omega = \delta_{m', m} (C_1 \delta_{l', l-1} + C_2 \delta_{l', l} + C_3 \delta_{l', l+1}). \quad (18.70)$$

Теперь функция $P_1(\cos \vartheta) = z/r$ становится нечетной. Это означает, согласно п. 29, что только состояния с различной четностью могут не равняться нулю в матричных элементах $P_1(\cos \vartheta)$. Следовательно, C_2 должно быть равно нулю, и потому еще раз получаем правила отбора $m' = m$, $l' = l \pm 1$.

Обобщение на случай произвольных направлений распространения и поляризации. Можно также обобщить правила отбора на случай плоской волны, поляризованной в произвольном направлении, определяемом направляющими косинусами $\cos \alpha$, $\cos \beta$ и $\cos \gamma$. Для этого надо воспользоваться уравнением (18.51). Мы видим, что матричный элемент равен

$$\int f_{l', n'}(r) Y_{l'}^{m'*}(\vartheta, \varphi) [r(\cos \gamma \cos \vartheta + \cos \alpha \sin \vartheta \cos \varphi + \\ + \cos \beta \sin \vartheta \sin \varphi)] Y_l^m(\vartheta, \varphi) f_{l, n}(r) r^2 dr. \quad (18.71)$$

Легко видеть, что члены, содержащие $\sin \vartheta \cos \varphi$ и $\sin \vartheta \sin \varphi$, после интегрирования по ϑ и φ исчезают во всех случаях, кроме $l' = l + 1$. Это можно показать, повернув просто координатные оси таким образом, чтобы новая ось z совпала со старой осью x . Тогда член $x = r \cos \varphi \sin \vartheta$ превращается в $z' = r' \cos \vartheta'$. Мы уже видели, что для этого случая матричные элементы равны нулю, кроме случая

$$l' = l \pm 1.$$

Но значение l не изменяется при повороте, так как выражение $l(l+1)\hbar^2$ как раз равно квадрату абсолютного значения момента, который является скаляром. Поэтому те же правила отбора для l должны действовать и в первоначальной координатной системе.

Добавочное правило отбора можно получить, если заметить, что

$$\int_0^{2\pi} e^{-im'\varphi} \cos \varphi e^{im\varphi} d\varphi \quad \text{и} \quad \int_0^{2\pi} e^{im'\varphi} \sin \varphi e^{im\varphi} d\varphi$$

равны нулю, кроме случая $m' = m \pm 1$. Если волна имеет компоненты поляризации в направлении осей x или y , то m может изменяться только на ± 1 .

Сводка правил отбора для дипольных переходов.

$$1) \Delta l = \pm 1.$$

2) $\Delta m = 0$ для волн, поляризованных в направлении оси z .

$\Delta m = \pm 1$ для волн, поляризованных в направлении оси x или y .

Если волны поляризованы в произвольном направлении, то $\Delta m = 0$ или ± 1 .

32. Запрещенные переходы, электрическое квадрупольное излучение. Если дипольный матричный элемент ξ_{mn} равен нулю, то это не означает, что не происходит никаких переходов. Отсюда следует только то, что нельзя больше пренебрегать членами высших порядков при разложении выражения (18.44). Мы увидим, что они тоже могут обусловить переходы, но со значительно меньшей вероятностью.

Первый член, которым мы пренебрегали в α_{mn} , равен (для волны, поляризованной в направлении оси z)

$$\begin{aligned} \hbar k \int U_m^*(\mathbf{x}) x \frac{\partial}{\partial z} U_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \\ = \frac{\hbar k}{2} \int U_m^*(\mathbf{x}) \left[\left(x \frac{\partial}{\partial z} + z \frac{\partial}{\partial x} \right) + \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] U_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (18.72)$$

Рассмотрим прежде всего выражение

$$\hbar \frac{k}{2} \int U_m^*(\mathbf{x}) \left(x \frac{\partial}{\partial z} + z \frac{\partial}{\partial x} \right) U_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Пользуясь методами, аналогичными тем, которые использовались при вычислении выражения (18.48) для дипольных переходов, можно показать, что

$$\begin{aligned} \frac{\hbar k}{2} \int U_m^*(\mathbf{x}) \left(x \frac{\partial}{\partial z} + z \frac{\partial}{\partial x} \right) U_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \\ = im\omega_{mn} \int U_m^*(\mathbf{x}) xz U_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (18.73)$$

Задача 5. Доказать это утверждение.

Написанный выше интеграл есть своего рода среднее значение одной из компонент квадрупольного момента заряда *), вычисленное с функцией вероятности $U_m^*(\mathbf{x}) U_n(\mathbf{x})$. Записав $k = 2\pi/\lambda$, мы видим, что этот интеграл включает в подынтегральное выражение те же

*) Квадрупольный момент распределения заряда представляет собой тензор с двумя индексами, определенный следующим образом:

$$\varphi_{ij} = \int \rho(\mathbf{x}) x_i x_j d\mathbf{x},$$

где x_i являются координатами (т. е. $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$). Можно показать, что эти члены приводят к такому же распределению излучения, к какому привел бы колеблющийся электрический квадруполь. См., например, [21], стр. 177.

множители, какие были в дипольном моменте, и, кроме того, множитель $2\pi x/\lambda$. Так как линейные размеры атома значительно меньше длины волны, то этот интеграл будет меньше, чем типичные дипольные моменты, на множитель $2\pi a/\lambda$, где a — радиус атома. Для типичных длин волн λ и атомных радиусов a это отношение порядка 0,01. Так как вероятность перехода пропорциональна $|\alpha_{nm}|^2$, то это означает, что когда дипольные переходы запрещены, то квадрупольные переходы могут, вообще говоря, осуществляться, но с вероятностью, меньшей примерно в 10 000 раз вероятности дипольных переходов.

33. Магнитное дипольное излучение. Член в уравнении (18.72), включающий выражение $x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x}$, представляет собой (за исключением множителя i) как раз оператор момента количества движения L_y . Действительно, этот член напоминает среднее значение магнитного момента, вычисленное с функцией вероятности $U_m^*(x) U_n(x)$. Поэтому переходы, обусловленные этим членом, называются магнитным дипольным излучением. Можно показать, что эти члены приводят к такому же угловому распределению излучения, какое дал бы колеблющийся магнитный диполь. Можно также показать, что вероятность магнитного дипольного излучения по порядку величины такая же, как и вероятность электрического квадрупольного излучения. Магнитный дипольный момент движущегося электрона в v/c раз меньше электрического дипольного момента, что связано с множителем v/c , который по порядку величины равен 0,01 для большинства атомов.

34. Правила отбора для электрического квадрупольного излучения.

1) *Четность.* Матричный элемент четный, так как в результате этого типа возмущений осуществляются лишь те переходы, в которых четность не изменяется. Так как мы показали, что функции будут четными или нечетными в зависимости от того, будут ли у них четные или нечетные l -члены, то ясно, что в квадрупольных переходах Δl должно быть четным числом.

2) *Момент количества движения.* Можно показать, что элементы тензора квадрупольного момента $x_i x_j$ можно выразить как линейную комбинацию сферических гармоник Y_2^m .

Задача 6. Доказать это утверждение.

Поэтому правила отбора будут те же самые, что и в случае матричных элементов

$$\int Y_{l'}^{m'} Y_2^{m''} Y_l^m d\Omega.$$

Согласно уравнению (17.776),

$$Y_2^m Y_l^m = C_2 Y_{l-2}^{m+m''} + C_{-1} Y_{l-1}^{m+m''} + C_0 Y_l^{m+m''} + C_1 Y_{l+1}^{m+m''} + C_2 Y_{l+2}^{m+m''}.$$

Однако так как четность не меняется, то мы знаем, что C_{-1} и C_1 должны равняться нулю. Это дает нам правила отбора:

$$\Delta l = 0, \pm 2; \quad \Delta m = 0, \pm 1, \pm 2. \quad (18.74)$$

35. Правила отбора для магнитного дипольного излучения.

1) *Четность.* $x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x}$ — четная функция, следовательно, этот тип перехода также оставляет четность неизменной.

2) *Момент количества движения.* Матричный элемент магнитного диполя пропорционален выражению

$$\int Y_{l'}^{m'}(\vartheta, \varphi) L_y Y_l^m(\vartheta, \varphi) d\Omega.$$

В уравнении (14.27) мы показали, что

$$(L_x + iL_y)\psi_l^m(\vartheta, \varphi) \sim \psi_l^{m-1}(\vartheta, \varphi).$$

Аналогично

$$(L_x - iL_y)\psi_l^m(\vartheta, \varphi) \sim \psi_l^{m+1}(\vartheta, \varphi).$$

Поэтому написанный выше матричный элемент будет равен нулю для всех случаев, кроме $l = l'$ и $m' = m \pm 1$.

Однако это не самый общий возможный вид матричного элемента для магнитного дипольного излучения. Например, можно было бы положить, что излучение распространяется в направлении оси x , а поляризовано в направлении оси y . Тогда в интеграле мы должны были бы получить

$$\left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{iL_z}{\hbar}.$$

Но $L_z \psi_l^m(\vartheta, \varphi) = m \psi_l^m$. При испускании или поглощении такой волны должно быть $m' = m$. Следовательно, если включить все возможные поляризации, то правила отбора будут

$$\Delta l = 0; \quad \Delta m = 0, \pm 1. \quad (18.75)$$

36. Переходы более высокого порядка. При таких переходах, когда запрещены все электрические дипольные, магнитные дипольные и электрические квадрупольные переходы (например, $\Delta l > 2$), необходимо перейти к членам еще более высоких порядков в разложении экспоненциалов в уравнении (18.316). Можно показать, что эти члены в классическом пределе дадут такой тип излучения, который будет совпадать с излучением от электрического и магнитного мультиполей высших порядков. Например, член $k^2 x^2$ в разложении приводит к излучению магнитного квадрупольного и электрического октупольного. Каждый раз при переходе к члену более высокого порядка в разложении получается интеграл, уменьшенный на множитель порядка $2\pi a/\lambda$, где a — радиус атома, а потому вероятность перехода

уменьшится на множитель порядка $(2\pi a/\lambda)^2$, что приближенно равно $1/10\,000$.

37. Полностью запрещенные переходы между состояниями с $l=0$. Можно получить довольно важное правило отбора, а именно что переходы из состояния с $l=0$ в состояние также с $l=0$ полностью запрещены для *всех* порядков мультиполей излучения. Для доказательства этого рассмотрим общий матричный элемент. Заметим, что и U_m , и U_n — функции только r , так как они представляют s -состояния

$$\frac{\hbar}{i} \int f_m(r) \frac{\partial}{\partial x_j} e^{ikx} f_n(r) dx;$$

$\frac{\partial}{\partial x_j}$ относится к дифференцированию в направлении поляризации волны. Условие поперечности требует, чтобы $\mathbf{k}$ было нормально к x_j . Этот интеграл может быть записан в виде

$$\frac{\hbar}{i} \int f_m(r) e^{ikx} x_j \frac{f'_n(r)}{r} dx.$$

Так как подынтегральная величина — нечетная функция x_j , то она при интегрировании по x_j должна равняться нулю. Следовательно, матричный элемент равен нулю для всех порядков мультиполей.

Это правило отбора указывает на возможность метастабильного состояния с очень долгим временем жизни. Например, если, как это бывает для многих атомов, и для основного состояния, и для следующего ближайшего к нему возбужденного состояния $l=0$, то атом, который попадает в это возбужденное состояние, не может освободиться от своей энергии возбуждения путем излучения и остается возбужденным в течение долгого времени. Атомы водорода и благородных газов, таких, как гелий, неон и аргон, обладают подобного рода метастабильными уровнями.

38. Полная вероятность излучения. До сих пор мы вычисляли только вероятность испускания излучения в данном направлении и при данном направлении поляризации. Чтобы получить полную интенсивность излучения, нужно проинтегрировать по всем направлениям испускания и просуммировать по обоим направлениям поляризации. Проведем здесь эти операции для специального случая дипольного перехода, когда $\Delta m=0$. Единственный матричный элемент, который не равен нулю для рассматриваемого случая, будет z_{nm} .

Рассмотрим световую волну, испускаемую в направлении с шириной A и азимутом B , как показано на рис. 76. Такая волна может иметь два направления поляризации: одно в плоскости, проходящей через направление луча и ось z , другое — в перпендикулярном направлении. У волны, которая поляризована в перпендикулярном направлении,

вектор электрического поля нормален к оси z . Следовательно, для такой волны матричный элемент ξ_{nm} должен быть равен нулю, так как при этом переходе не равен нулю только элемент z_{nm} . Для другой поляризации имеем (см. уравнение (18.52))

$$\xi_{nm} = z_{nm} \sin A - x_{nm} \cos A \cos B - y_{nm} \cos A \sin B.$$

Единственным слагаемым, не равным нулю, будет

$$\xi_{nm} = z_{nm} \sin A. \quad (18.76)$$

Таким образом, согласно уравнению (18.51), вероятность самопроизвольного испускания волны (на единицу телесного угла) в направлении, определяемом углами A и B , равна

$$dR = 8\pi^3 \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{\nu^3}{hc} |z_{nm}|^2 \sin^2 A d\Omega. \quad (18.77)$$

Заметим, что при этом переходе интенсивность излучения пропорциональна $\sin^2 A$. Это типичная картина дипольного излучения. Каждый тип мультиполя имеет свое собственное характерное распределение интенсивностей, которое может быть вычислено из матричных элементов. Полную интенсивность излучения можно получить путем интегрирования выражения (18.77) по всем телесным углам испускания со статистическим весовым множителем $\sin A dA dB$. Такое интегрирование дает

$$R = \frac{64\pi^4}{3} \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{\nu^3}{hc} |z_{nm}|^2. \quad (18.78)$$

Выражение (18.78) определяет интенсивность испускания квантов. Полная интенсивность испускания энергии получится, если умножить выражение (18.78) на энергию каждого кванта $h\nu$:

$$\frac{dW}{dt} = Rh\nu = \frac{64\pi^4}{3} \frac{e^2}{c^3} \nu^4 |z_{nm}|^2. \quad (18.79)$$

39. Сравнение с классической теорией. Согласно классической электродинамике, средняя интенсивность излучения энергии движущимся электроном равна (см. формулу (2.45))

$$\frac{dW}{dt} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} |\ddot{\mathbf{x}}|^2, \quad (18.80)$$

где $\ddot{\mathbf{x}}$ — ускорение.

Рассмотрим для простоты случай гармонического осциллятора, который возбуждается силой, направленной вдоль оси z . Его движение описывается выражением $z = z_0 \cos \omega t$, и тогда

$$\ddot{z} = -\omega^2 z_0 \cos \omega t, \quad (\ddot{z})^2 = \omega^4 z_0^2 \cos^2 \omega t = \frac{\omega^4 z_0^2}{2} (1 + \cos 2\omega t).$$

Если последнее выражение усреднить по периоду колебания, то член $\cos 2\omega t$ исчезает, и мы находим

$$\overline{(\ddot{z})^2} = \frac{\omega^4 z_0^2}{2}. \quad (18.81)$$

Энергия гармонического осциллятора определяется выражением $W = \frac{m\dot{z}^2}{2} + m\omega^2 \frac{z^2}{2}$. Когда z достигает максимума ($z = z_0$), то $\dot{z} = 0$, и тогда получаем

$$W = \frac{m\omega^2 z_0^2}{2} \quad \text{или} \quad z_0^2 = \frac{2W}{m\omega^2}$$

и

$$\overline{(\ddot{z})^2} = \frac{\omega^2 W}{m}. \quad (18.82)$$

Средняя классическая интенсивность излучения тогда будет равна

$$\frac{dW}{dt} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} |\ddot{x}|^2 = \frac{2}{3} \frac{e^2}{mc^3} \omega^2 W. \quad (18.83)$$

Сравним это с квантовомеханической интенсивностью излучения гармонического осциллятора. Из формулы (18.57) можно получить z_{nm} , и, используя выражение (18.79) для dW/dt , имеем

$$\frac{dW}{dt} = \frac{\hbar}{2m\omega} n_z \nu^4 \frac{64\pi^4}{3} \frac{e^2}{c^3}. \quad (18.84)$$

Для сравнения с классической интенсивностью напомним $\hbar\omega n_z \cong W$ (в классическом пределе), тогда

$$\frac{dW}{dt} = \frac{32\pi^4}{3} \frac{W}{m} \frac{e^2}{c^3} \frac{\nu^4}{\omega^2} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{mc^3} \omega^2 W. \quad (18.85)$$

Мы получили тот же результат, что и в классической теории (уравнение (18.83)). Таким образом, для гармонического осциллятора квантовая теория дает ту же интенсивность излучения, что и классическая теория.

Для сравнения квантовой интенсивности излучения с классической в произвольной системе воспользуемся результатами уравнения (2.48), что средняя по времени интенсивность излучения энергии для n -й гармоники в классической системе с собственной угловой частотой ω_0 равна

$$\bar{R} = \frac{1}{3} \frac{e^2}{c^3} \omega_0^4 |a_n|^2 n^4. \quad (18.86)$$

Как показано в уравнении (2.53), n -я гармоника соответствует скачку сразу в n -е квантовое состояние с изменением энергии $\Delta E = n\omega_0\hbar$. Мы видели, что средняя интенсивность излучения квантов пропор-

циональна квадрату абсолютной величины матричного элемента, соответствующего данному переходу. Теперь можно показать [5], что в пределе больших квантовых чисел матричный элемент $a_{m, m+n}$ приближается к классической компоненте Фурье a_n . Таким образом, в классическом пределе квантовая теория предсказывает интенсивность излучения n -й гармоники, пропорциональную $|a_n|^2$, в согласии с результатами классической теории. С помощью непосредственных вычислений можно показать, что коэффициент пропорциональности таков, что он точно приводит к уравнению (18.86).

40. Правила сумм для вычисления матричных элементов. Можно получить ряд полезных правил для вычисления сумм матричных элементов, соответствующих переходам из данного квантового состояния (или в это состояние), если использовать некоторые математические свойства матриц. Для иллюстрации этих правил начнем с рассмотрения операторного соотношения

$$px - xp = i\hbar. \quad (18.87)$$

В гейзенберговском представлении имеем, согласно задаче 17 гл. 16, следующее матричное соотношение:

$$p = m\dot{x}. \quad (18.88)$$

Если преобразовать гамильтониан к диагональному виду, то, как мы видели в случае уравнения (16.46), каждый матричный элемент колеблется, как экспонента $e^{i(E_m - E_n)t/\hbar}$. Таким образом, получаем

$$(\dot{x})_{mn} = \frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) x_{mn}. \quad (18.89)$$

Тогда уравнение (18.87) принимает вид

$$\frac{mi}{\hbar} \sum_n [(E_m - E_n) x_{mn} x_{nr} - x_{mn} x_{nr} (E_n - E_r)] = i\hbar \delta_{mr}. \quad (18.90)$$

(Заметим, что единичная матрица представлена при помощи δ_{mr} .)

Если положить $m=r$, то получим

$$\sum_n (E_m - E_n) x_{mn} x_{nm} = \frac{\hbar^2}{2m}.$$

Так как x_{mn} — эрмитова матрица, то $x_{nm} = x_{mn}^*$ и, следовательно,

$$\sum_n (E_m - E_n) |x_{mn}|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}. \quad (18.91)$$

Это выражение часто может быть полезным, потому что оно дает связь между величинами $|x_{mn}|^2$, входящими в вероятности переходов на и с n -го уровня. Такое правило называется *правилом суммы*.

Практически величины $|x_{mn}|^2$ становятся малыми при больших n , так что это соотношение может быть экспериментально проверено при наблюдении переходов для нескольких значений n , близких к m .

Другой пример правила суммы получается из матричного соотношения

$$\sum_n |x_{mn}|^2 = \sum_n x_{mn} x_{nm} = (x^2)_{mm} = \int \psi_m^* x^2 \psi_m dx. \quad (18.92)$$

Оно означает, что сумма квадратов матричных элементов, включающих m -й уровень, может быть получена просто из среднего значения x^2 в m -м состоянии.

41. Круговая поляризация. До сих пор мы рассматривали плоскополяризованные световые волны. Посмотрим теперь, что происходит со светом, поляризованным по кругу.

Поляризованный по кругу влево световой пучок, распространяющийся в направлении оси z , может быть описан следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} A_x &= A_0 \cos(\omega t - kz), \\ A_y &= A_0 \sin(\omega t - kz). \end{aligned} \right\} \quad (18.93)$$

(Заметим, что A_y на 90° отличается по фазе от A_x .)

В такой волне направление A вращается с угловой частотой ω против часовой стрелки. Для того чтобы получить волну, где A вращается по часовой стрелке, можно написать

$$\left. \begin{aligned} A_x &= A_0 \cos(\omega t - kz), \\ A_y &= -A_0 \sin(\omega t - kz). \end{aligned} \right\} \quad (18.94)$$

Полученные результаты можно записать в форме, более удобной для нашей цели, следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \text{поляризованный вправо } A_x &= [A_0 e^{i(kz - \omega t)} + A_0^* e^{-i(kz - \omega t)}], \\ A_y &= i[A_0 e^{i(kz - \omega t)} - A_0^* e^{-i(kz - \omega t)}]; \\ \text{поляризованный влево } A_x &= [A_0 e^{i(kz - \omega t)} + A_0^* e^{-i(kz - \omega t)}], \\ A_y &= -i[A_0 e^{i(kz - \omega t)} - A_0^* e^{-i(kz - \omega t)}]. \end{aligned} \right\} \quad (18.95)$$

Можно создать плоскополяризованную волну при интерференции двух противоположно поляризованных по кругу волн. Например, пусть A_+ — векторный потенциал поляризованной вправо волны, A_- — поляризованной влево. Тогда $A_+ + A_-$ будет плоскополяризованной волной в направлении оси x . Это следует из того, что y -компоненты обеих волн взаимно уничтожаются. Аналогично $A_+ - A_-$ — плоскополяризованная волна в направлении оси y .

42. Эллиптическая поляризация. Если взять две плоские волны, поляризованные под прямым углом, которые или отличаются по фазе

не на 90° , или не обладают одинаковой интенсивностью, то мы получим волны, поляризованные по эллипсу. Мы не будем подробно разбирать эти случаи, а только отметим, что эллиптически поляризованные волны могут быть описаны сравнительно простым обобщением методов, применяемых для волн, поляризованных по кругу.

43. Квантовая трактовка. Для вычисления вероятности переходов, которые возникают от волны, поляризованной по кругу, нужно подставить полный векторный потенциал для этой волны в уравнение (18.23) при вычислении матричных элементов $V_{mm'}$. Для упрощения рассмотрим распространяющуюся в направлении оси z волну, которая поляризована по кругу в плоскости xu . Используя уравнение (18.46), мы видим, что матричный элемент включает выражение

$$A_0 \int U_m^*(\mathbf{x}) \left[\frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y} \right] U_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \\ + A_0^* \int U_m^*(\mathbf{x}) \left[\frac{\partial}{\partial x} \mp i \frac{\partial}{\partial y} \right] U_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (18.96)$$

(Знак «+» относится к правой поляризации, знак «—» к левой поляризации.) Рассуждениями, аналогичными тем, которые привели к уравнению (18.48), можно показать, что этот матричный элемент пропорционален величине

$$i\omega \int U_m^*(\mathbf{x}) [A_0(x \pm iy) + A_0^*(x \mp iy)] U_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (18.97)$$

44. Правила отбора. Рассмотрим переход, в котором

$$U_m = f_{l', n'}(r) P_{l'}^{m'}(\vartheta) e^{im'\varphi} \quad \text{и} \quad U_n = f_{l, n}(r) P_l^m(\vartheta) e^{im\varphi}. \quad (18.98)$$

Написав $x \pm iy = re^{\pm i\varphi}$, мы замечаем, что для света, поляризованного по кругу влево, матричный элемент равен нулю во всех случаях, кроме $m' = m - 1$, а для круговой поляризации вправо он не исчезает только при $m' = m + 1$. Если эти условия не выполняются, то интеграл по φ будет всегда равен нулю. Поэтому переход, при котором $m' = m + 1$, дает в результате свет, поляризованный по кругу вправо, по крайней мере для волны, распространяющейся в направлении оси z , в то время как переход с $m' = m - 1$ дает волну противоположно поляризованную.

Однако для света, испускаемого нормально к оси z , поляризация будет линейной для любого перехода, в котором имеем определенное изменение m . Например, рассмотрим свет, распространяющийся в направлении оси x . Он может иметь два направления поляризации: в направлении оси z или в направлении оси y . Как уже было показано, переход, в котором $\Delta m = 0$, может создавать лишь свет, поляризованный в направлении оси z , а если $\Delta m = \pm 1$, то свет должен быть линейно поляризован нормально к направлению оси z .

Это, однако, не означает, что свет, поляризованный по кругу, не может испускаться в направлении оси x . Это только означает, что при переходе, в котором изменение z -составляющей момента количества движения (Δm) точно определено, распространяющийся нормально к оси z свет поляризован линейно. При переходе, в котором изменение x -компоненты вектора L было точно определено, можно получить поляризованный по кругу свет, распространяющийся в направлении оси x .

Если изменение L_z точно определено, то можно показать, что свет, распространяющийся в направлении, которое ни параллельно, ни перпендикулярно z , будет поляризован эллиптически.

45. Применение к случаю нормального зееман-эффекта.

Классическая трактовка. Ларморовская прецессия. Если атом помещен в слабое магнитное поле, то по классической теории можно показать, что орбита прецессирует около оси, параллельной магнитному полю, с угловой частотой $\Omega = e\mathcal{H}/2\mu c$, где μ — масса электрона. Эта прецессия называется прецессией Лармора, а частота — частотой Лармора (см. [45], стр. 103, а также [40]). (Заметим, что эта частота равна лишь половине «циклотронной частоты», т. е. частоты, с которой *свободный* электрон обходит окружность в магнитном поле.)

Рассмотрим сначала какую-то отдельную орбиту, по которой частица, например, вращается вокруг оси z с угловой частотой $\pm \omega$; $+\omega$ означает вращение против часовой стрелки, $-\omega$ означает вращение по часовой стрелке. Если наблюдать атом в направлении оси z , то мы обнаружим свет, поляризованный по кругу, причем электрический вектор вращается в том же направлении, что и электрон. Если наблюдать атом нормально к оси z , то достигающее нас электрическое поле зависит только от проекции движения электрона на ось, нормальную к направлению наблюдения. Проекция кругового движения на такую ось является просто прямолинейным гармоническим движением, так что свет, видимый в направлении, параллельном плоскости движения, будет поляризован в направлении, перпендикулярном к направлению наблюдения и параллельном плоскости движения электрона.

Если магнитное поле повернуть в направлении z , то компоненты движения в направлении z остаются неизменными, а компоненты движения в плоскости xu изменяются. Частоты атомов, вращающихся по орбитам против часовой стрелки в плоскости xu , возрастают на $e\mathcal{H}/2\mu c$, а частоты атомов, вращающихся по часовой стрелке, убывают на ту же величину. Поэтому при наблюдении вдоль направления магнитного поля линия излучения расщепляется на две линии с противоположно направленной круговой поляризацией, как показано на рис. 77. Электроны, движущиеся в направлении оси z , не могут излучать в этом направлении, поэтому в свете, испускаемом в направлении оси z , не будет неотклоненных линий. Если атом наблюдается нормально к оси z , то

там будет неотклоненная линия, создаваемая электронами, которые движутся в направлении оси z . Она будет поляризована в направлении оси z . Компоненты движения электрона в плоскости xu создадут две отклоненные линии, каждая из которых будет линейно поляризована в направлении, нормальном к оси z . Общая картина

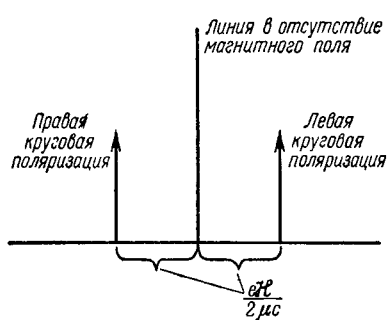


Рис. 77.

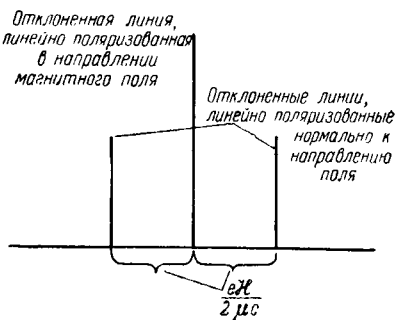


Рис. 78.

показана на рис. 78. Если излучение наблюдается в каком-либо промежуточном направлении, то получается эллиптически поляризованный свет.

46. Квантовое описание нормального зееман-эффекта. Как было показано в уравнении (15.53), энергетические уровни атома в магнитном поле смещаются на величину

$$\Delta E = - \frac{e\hbar}{2\mu c} m\hbar, \quad (18.99)$$

где m есть z -компонента момента количества движения. Чтобы видеть, как это смещение влияет на излучаемые частоты, воспользуемся правилами отбора для дипольного перехода: $\Delta m = 0$ или ± 1 . При переходе $\Delta m = 0$ начальный уровень смещается точно так же, как и конечный, т. е. излучаемая частота остается без изменения. Если $\Delta m = +1$, то конечный уровень смещается больше, чем начальный, и излучаемая угловая частота убывает на величину

$$\Delta\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} = - \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}. \quad (18.100)$$

Наоборот, когда $\Delta m = -1$, излучаемая угловая частота возрастает на величину

$$\Delta\omega = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}.$$

Таким образом, в общем случае спектральная линия расщепляется на три компоненты, точно, как предсказывается классической теорией.

Правила отбора иллюстрируются на схеме переходов, показанной на рис. 79 для случая переходов с уровня $l=2$ на уровень $l=1$. (Заметим, что для дипольных переходов $\Delta l = \pm 1$.)

Если излучение наблюдается вдоль направления магнитного поля, то в матричном элементе могут появляться только координаты x и y ,

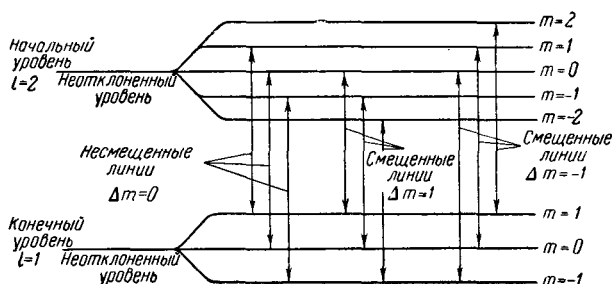


Рис. 79.

так что переход с $\Delta m = 0$ не участвует в образовании этой линии. Переход с $\Delta m = +1$ приводит к круговой поляризации света вправо, а $\Delta m = -1$ дает круговую поляризацию влево. В результате вдоль направления магнитного поля появляются только две линии, причем каждая смещена от первоначальной линии одинаково, но в противоположных направлениях, и они противоположно поляризованы.

Если наблюдать свет нормально к магнитному полю, скажем в направлении оси x , то он может быть поляризован или в направлении оси z , или оси y . Мы уже видели, что для переходов, в которых $\Delta m = 0$, из всех матричных элементов не равен нулю только элемент z_{mn} . Это означает, что переходы с $\Delta m = 0$ дают свет, поляризованный в направлении оси z . В результате линия расщепляется на три компоненты: во-первых, неотклоненная компонента, поляризованная в направлении оси z , и, во-вторых, две компоненты, смещенные соответственно на $\pm e\hbar/2\mu c$ и поляризованные в направлении, перпендикулярном к оси z .

47. Аномальный зееман-эффект. Мы видим, что предсказания квантовой теории относительно зееман-эффекта в точности такие же, как и предсказания классической теории. Однако найдено, что в большинстве атомов наблюдаемое зеемановское расщепление значительно сложнее, чем это описано выше. Говорят, что в этом случае имеет место «аномальный эффект Зеемана». Однако если учесть существование электронного спина, то линии аномального эффекта Зеемана могут быть предсказаны точно. Только в атомах, в которых полный электронный спин равен нулю, имеет место описанная выше простая, или «нормальная», картина [45, 40].

48. Общие методы вычисления вероятностей переходов. Здесь вычислялись вероятности переходов, только создаваемые излучением. Однако ясно, что теми же методами можно пользоваться и при любом возмущающем потенциале, например таком, который существовал бы, если бы мы имели произвольную возмущающую силу, изменяющуюся со временем. Во всех случаях самым существенным является вычисление матричных элементов V_{mn} . Правила отбора всегда получаются при определении тех переходов, для которых V_{mn} исчезает.

Задача 7. Вычислить среднее время жизни для испускания фотонов атомом водорода в состоянии $n=2$, $l=1$, $m=0$. Для этой цели следует использовать уравнения (18.63) и (18.78). Атом в этом состоянии может, согласно правилам отбора, совершать переходы в основное состояние ($n=1$, $l=0$, $m=0$).

Задача 8. Какой тип перехода требуется для атома водорода в состоянии $l=2$, $n=3$, чтобы перейти в основное состояние? Определить приблизительно отношение вероятности этого перехода к вероятности перехода, указанного в предыдущей задаче.

49. Влияние спина электрона на вероятности переходов. Выясним теперь вопрос, как изменится гамильтониан при учете взаимодействия между спином электрона и полем излучения. В этом случае в дополнение к обычному члену (см. уравнение (18.22)), содержащему векторный потенциал, необходимо добавить энергию взаимодействия, определяемую уравнением (17.79):

$$W_{\text{сп}} = \frac{e\hbar}{2mc} \left(\sigma \mathcal{H} + \sigma \left[\frac{v}{c} \mathcal{E} \right] \right). \quad (18.101)$$

Так как для электромагнитной волны $|\mathcal{E}| = |\mathcal{H}|$ и для типичного атома $\frac{v}{c} \ll 1$, то вторым членом в правой части уравнения (18.101) можно пренебречь. Для плоской волны $\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{kx} - \omega t)}$, поэтому можно написать

$$\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A} = i[\mathbf{kA}_0] e^{i(\mathbf{kx} - \omega t)}.$$

После этих упрощений получаем

$$W_{\text{сп}} \cong -\frac{e\hbar}{2mc} \text{Re} (e^{i(\mathbf{kx}_0 - \omega t)} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)} \sigma[\mathbf{kA}_0]), \quad (18.102)$$

где символ Re означает действительную часть комплексного выражения, а $\mathbf{x}_0$ — положение центра атома.

Как и в случае вывода уравнения (18.45), разлагаем в ряд функцию $e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}$, сохраняя на этот раз и первую степень $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, потому что член нулевой степени разложения, не содержащий $\mathbf{x}$, дает нулевые матричные элементы между любыми двумя ортогональными волновыми функциями. Таким образом, можно оставить только

первый член в разложении $e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)}$, что дает

$$W_{\text{сп}} \cong -\frac{e\hbar}{2mc} \operatorname{Re} (ie^{i(\mathbf{k}\mathbf{x}_0 - \omega t)} \mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \boldsymbol{\sigma} [\mathbf{kA}_0]). \quad (18.103)$$

Тогда спиновый матричный элемент между двумя состояниями будет иметь вид

$$(W_{\text{сп}})_{ab} = \int \psi_a^* W_{\text{сп}} \psi_b d\mathbf{x}, \quad (18.104)$$

причем функции ψ_a и ψ_b зависят как от пространственных, так и от спиновых координат электрона. Для более явной записи величин выпишем функции ψ_a и ψ_b в векторном представлении в виде столбцов (см. гл. 17, п. 5)

$$\psi_a = \begin{pmatrix} \psi_{a1} \\ \psi_{a2} \end{pmatrix}, \quad \psi_b = \begin{pmatrix} \psi_{b1} \\ \psi_{b2} \end{pmatrix}, \quad (18.105)$$

а скалярное произведение $(\boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\mathcal{E}})$ в виде матрицы

$$\begin{pmatrix} \mathcal{E}_z & \mathcal{E}_x - i\mathcal{E}_y \\ \mathcal{E}_x + i\mathcal{E}_y & -\mathcal{E}_z \end{pmatrix}. \quad (18.106)$$

Оценим порядок величины матричного элемента (18.104). Интегрирование выражения $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ дает члены того же порядка величины, что и члены, входящие в выражение дипольного момента z_{mn} уравнения (18.47). Спиновый оператор $\boldsymbol{\sigma}$ в матричном элементе дает множитель порядка единицы (потому что все не равные нулю матричные элементы операторов σ_x , σ_y и σ_z по абсолютной величине равны единице.) Отношение спиновых матричных элементов (18.104) к орбитальным матричным элементам (18.47) будет тогда порядка $\hbar k^2 / 2m\omega$. Заменяя $\omega = ck$, получаем для этого отношения

$$\frac{\hbar k}{2mc} = \frac{\hbar}{2\lambda mc}. \quad (18.107)$$

Для типичного случая ($\lambda \cong 5 \cdot 10^{-5}$ см) это отношение равно $\sim 10^{-6}$. Так как вероятность перехода изменяется, как квадрат матричного элемента, то, следовательно, переходы, вызванные наличием спина, происходят в 10^{12} раз реже, чем переходы, вызванные электрическими дипольными членами. Это означает, что члены гамильтониана, обусловленные спином, обычно весьма незначительны для большинства переходов, до тех пор пока члены гамильтониана, в которые входит векторный потенциал, не будут связаны с переходами, чрезвычайно сильно запрещенными правилами отбора.

50. Случай в: возмущение V_{mn} , медленно изменяющееся со временем (адиабатический случай). Часто возмущение возникает очень медленно; например, в эффекте Зеемана магнитное поле

нарастает в течение интервала времени, который может быть очень велик по сравнению с атомными периодами. После того, как возмущение достигло своего предельного значения, оно остается постоянным. Однако в этом случае рассмотренную выше теорию нельзя применить для постоянной во времени матрицы возмущения V_{mn} ,

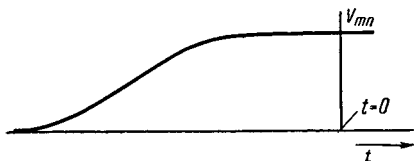


Рис. 80.

потому что при выводе предыдущих результатов мы предполагали, что возмущающий потенциал возник внезапно в момент $t = t_0$. Выясним теперь, что произойдет, если возмущение включается постепенно.

Типичное поведение величин V_{mn} со временем в этом случае показано на рис. 80. Когда $t \rightarrow -\infty$, $V_{mn} \rightarrow 0$ асимптотически. Для положительных значений t V_{mn} асимптотически приближается к постоянной величине. Для промежуточных значений времени изменение V_{mn} происходит плавно и медленно.

Рассмотрение следует начать с уравнения (18.9а) для коэффициентов C_m . Так как $V_{mn} \rightarrow 0$ интегрируемым путем при $t \rightarrow -\infty$, то можно с ничтожной ошибкой заменить нижний предел t_0 на $-\infty$:

$$C_m = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \lambda V_{ms}(t) e^{i(E_m^0 - E_s^0)t/\hbar} dt.$$

Такая замена справедлива, если коэффициенты C_m малы.

Проинтегрируем это выражение по частям, замечая, что

$$V_{ms}(-\infty) = 0.$$

В результате получим

$$C_m = -\frac{\lambda V_{ms}(t) e^{i(E_m^0 - E_s^0)t/\hbar}}{(E_m^0 - E_s^0)} + \int_{-\infty}^t \frac{e^{i(E_m^0 - E_s^0)t/\hbar}}{(E_m^0 - E_s^0)} \frac{d(\lambda V_{ms})}{dt} dt. \quad (18.108)$$

Заметим здесь, что так как величины V_{ms} стремятся к постоянному значению при больших положительных t , то при этом производная $dV_{ms}/dt \rightarrow 0$.

Таким образом, с ничтожной ошибкой можно заменить пределы интегрирования на $\pm \infty$, если мы хотим рассматривать времена, большие чем $t = 0$. Это дает,

$$C_m = -\frac{\lambda V_{ms} e^{i(E_m^0 - E_s^0)t/\hbar}}{E_m^0 - E_s^0} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(E_m^0 - E_s^0)t/\hbar}}{E_m^0 - E_s^0} \frac{d}{dt} (\lambda V_{ms}) dt. \quad (18.109a)$$

Интеграл в правой части в точности пропорционален компоненте Фурье функции dV_{ms}/dt , соответствующей частоте $\omega_{ms} = (E_m^0 - E_s^0)/\hbar$. Приближенный вид функции dV_{ms}/dt изображен на рис. 81. Она начинается с нуля при $t \rightarrow -\infty$, достигает максимума и вновь спадает до нуля при $t \rightarrow +\infty$. Имеется некоторый средний интервал времени Δt , в течение которого функция dV_{ms}/dt велика. Из теории волновых пакетов мы знаем, что компоненты Фурье функции dV_{ms}/dt будут велики лишь в интервале частот $\Delta\omega \sim 1/\Delta t$. Поэтому интегралом в правой части уравнения (18.109а) можно пренебречь, если

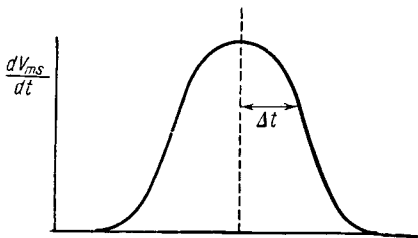


Рис. 81.

$$\Delta\omega = \frac{(E_m^0 - E_s^0)}{\hbar} > \frac{1}{\Delta t} \quad \text{или} \quad E_m^0 - E_s^0 > \frac{\hbar}{\Delta t}.$$

Задача 9. Предположим, что $\frac{dV_{ms}}{dt} = \lambda \exp[-t^2/2(\Delta t)^2]$. Показать, что если $\Delta t \gg \hbar/(E_m^0 - E_s^0)$, то компонента Фурье в уравнении (18.109а) становится исчезающе малой.

Следовательно, если $(E_m^0 - E_s^0)\hbar > 1/\Delta t$, то можно написать

$$C_m \cong - \frac{\lambda V_{ms}}{E_m^0 - E_s^0} e^{i(E_m^0 - E_s^0)t/\hbar}. \quad (18.109б)$$

Поэтому мы заключаем, что если потенциал включать бесконечно медленно, то в коэффициенте C_m останется лишь член, который колеблется с угловой частотой $(E_m^0 - E_s^0)/\hbar$. Сравнивая это с результатами для случая внезапного включения возмущения (уравнение (18.13)), мы видим, что в последнем случае существует добавочный член, который не колеблется со временем.

Результат очень похож на случай гармонического осциллятора с собственной частотой ω_0 , на который действует внешняя сила, гармонически изменяющаяся со временем с угловой частотой ω . Уравнение движения такой системы имеет вид

$$m(\ddot{x} + \omega_0^2 x) = F e^{i\omega t}.$$

Общее решение равно

$$x = A e^{i\omega_0 t} + B e^{-i\omega_0 t} + \frac{F}{m} \frac{e^{i\omega t}}{(\omega_0^2 - \omega^2)}.$$

При подходящем выборе A и B можно удовлетворить некоторым специальным граничным условиям, например:

$$x = \dot{x} = 0 \quad \text{при} \quad t = 0.$$

В общем случае A и B не равны нулю, и потому существуют так называемые «свободные колебания» с угловой частотой ω_0 . Однако если A и B равны нулю, то можно создать лишь «вынужденные» колебания с угловой частотой ω , равной частоте вынуждающей силы.

Как можно возбудить такие чисто «вынужденные» колебания? Один способ заключается в очень медленном по сравнению с периодом колебаний (или, можно сказать, адиабатическом) включении вынуждающей силы. Если увеличивать амплитуду вынуждающей силы очень медленно, то можно показать, что в пределе бесконечно медленного процесса роста F до конечного значения возникают только вынужденные колебания и постоянные $A = B = 0$.

Задача 10. Доказать это утверждение.

Аналогично можно рассматривать уравнение (18.1096) как определение характера колебаний C_m . Член в уравнении (18.108), содержащий $V_{ms} e^{i(E_m^0 - E_s^0)t/\hbar}$, действует как «вынуждающий», стремящийся заставить C_m колебаться с угловой частотой $(E_m^0 - E_s^0)/\hbar$. Если возмущение V_{ms} от нулевого значения нарастает медленно (или адиабатически), то коэффициенты C_m отзываются на колебания только с вынужденной частотой. Однако если V_{ms} заметно изменяется в течение времени, сравнимого с $\hbar/(E_m^0 - E_s^0)$, то возникают и «свободные» колебания C_m . Тогда возможно, что частота свободных колебаний равна нулю, т. е. член этого типа оказывается постоянным. Нулевое значение можно получить, если учесть, что в отсутствие вынуждающего члена в уравнении (18.8) последнее принимает вид $\hbar \dot{C}_m = 0$. Таким образом, в этом случае приходится считать, что собственная частота равна нулю.

Формула (18.108) представляет общий вид величин C_m при произвольном способе включения потенциала. Если функция $(dV/dt)_{mn}$ имеет компоненты Фурье, соответствующие угловым частотам $(E_m - E_n)/\hbar$, то коэффициенты C_m будут иметь добавочно большой постоянный член.

Выражение (18.108) можно также применить и при внезапном включении возмущения. В этом случае величины V_{ms} равны нулю для времен, меньших $t = t_0$, после чего V_{ms} становятся постоянными. Следовательно, V_{ms} имеют вид постоянных, умноженных на «ступенчатую функцию» $S(t - t_0)$. (Ступенчатая функция $S(t - t_0)$ равна нулю для $t < t_0$ и единице для $t > t_0$.) Можно показать, что производная ступенчатой функции равна δ -функции.

Задача 11. Доказать, что $\frac{dS(t-t_0)}{dt} = \delta(t-t_0)$.

У к а з а н и е. Рассмотреть интеграл δ -функции.

Таким образом, наш интеграл принимает вид

$$\frac{\lambda V_{ms} e^{i(E_m^0 - E_s^0)t_0/\hbar}}{E_m^0 - E_s^0}$$

$$C_m = \frac{\lambda V_{ms}}{E_m^0 - E_s^0} \left[e^{i(E_m^0 - E_s^0)t_0/\hbar} - e^{i(E_m^0 - E_s^0)t/\hbar} \right].$$

Сравнение этой формулы с выражением (18.13) показывает, что они совпадают.

51. Адиабатическое включение потенциала, приводящее к возмущению стационарного состояния. Из уравнения (18.109б) вытекают два важных следствия.

Во-первых, полная волновая функция (см. уравнение (18.4)) может быть записана в виде

$$\psi = C_s U_s e^{-iE_s^0 t/\hbar} + \sum_{n \neq s} C_n U_n e^{-iE_n^0 t/\hbar}. \quad (18.110)$$

Согласно уравнению (18.11), $C_s \cong e^{-i \int_{-\infty}^t \lambda V_{ss} dt/\hbar}$, но так как V_{ss} стремится к постоянной величине для $t > 0$, то имеем (для $t > 0$)

$$\int_{-\infty}^t \lambda V_{ss} \frac{dt}{\hbar} = \int_{-\infty}^0 \lambda V_{ss} \frac{dt}{\hbar} + \int_0^t \lambda V_{ss} \frac{dt}{\hbar} = \text{const} + \frac{\lambda V_{ss} t}{\hbar}.$$

Следовательно, $C_s = C_{s_0} e^{-i\lambda V_{ss} t/\hbar}$ и $C_{s_0} = e^{i\varphi}$, где φ — постоянный фазовый множитель. Постоянный фазовый множитель не имеет физического значения, он может быть включен в функцию U_s .

Для адиабатического случая коэффициенты C_n можно вычислить из уравнения (18.109б), поэтому для (18.110) получаем

$$\psi = U_s e^{-i(E_s^0 + \lambda V_{ss})t/\hbar} + \sum_{n \neq s} \frac{\lambda V_{ns} U_n}{E_s^0 - E_n^0} e^{-i(E_n^0 + E_s^0 - E_n^0)t/\hbar}.$$

Так как сумма по $n \neq s$ пропорциональна параметру λ , то ее можно умножить на функцию $e^{-i\lambda V_{ss} t/\hbar}$, что приводит к ошибке самое

большее порядка λ^2 . Следовательно, в первом приближении получаем

$$\psi = \left[U_s + \lambda \sum_{n \neq s} \frac{V_{ns} U_n(\mathbf{x})}{E_s^0 - E_n^0} \right] e^{-i(E_s^0 + \lambda V_{ss})t/\hbar} = f(\mathbf{x}) e^{-i(E_s^0 + \lambda V_{ss})t/\hbar}. \quad (18.111a)$$

Второй важный результат, получаемый из уравнения (18.109б), гласит:

$$|C_m|^2 = \frac{\lambda^2 |V_{ms}|^2}{(E_m^0 - E_s^0)^2}. \quad (18.111б)$$

Оба эти результата представляют значительный интерес. Первый из них (уравнение (18.111a)) показывает, что полная волновая функция колеблется (с точностью до членов первого порядка по λ) с угловой частотой $(E_s^0 + \lambda V_{ss})/\hbar$. Поэтому система находится в стационарном состоянии и все вероятности остаются постоянными во времени. Например, вероятность того, что система может находиться в m -м состоянии, дается уравнением (18.111б).

Этот результат справедлив, только если возмущение включается очень медленно. Если бы оно было включено быстро, то ψ не имело бы вида $f(\mathbf{x}) e^{-i(E_s^0 + \lambda V_{ss})t/\hbar}$ и тогда присутствовали бы другие различные частоты колебаний. Поэтому система не была бы в стационарном состоянии и вероятности флуктуировали бы со временем, как показано в уравнении (18.14a), которое описывает случай внезапного включения возмущения в момент $t = t_0$.

Как можно описать возникновение такого стационарного состояния? Можно по-прежнему воспользоваться представлениями, изложенными в п. 9, где принимается, что возмущение создает непрерывную возможность для системы совершать переходы в другие собственные состояния невозмущенной энергии H_0 . Однако если возмущение включается медленно, то система остается в состоянии, из которого переходы в другие состояния компенсируются обратными переходами в первоначальное состояние. В результате вероятность нахождения электрона в некотором другом состоянии остается постоянной с точностью до медленного возрастания вероятности, которое происходит во время включения возмущения. Если бы возмущение включалось быстро, то должна была бы существовать некомпенсированная, а потому быстро флуктуирующая вероятность того, что система должна совершать переход в какое-то другое состояние. Эта вероятность аналогична появлению свободных колебаний во внезапно возбужденном гармоническом осцилляторе. Однако следует еще раз подчеркнуть, что такая картина флуктуаций носит лишь приближенный характер, так как возможна интерференция между различными функциями $U_n(\mathbf{x})$. Для учета этого эффекта нужно представить себе,

что система флуктуирует одновременно во все возможные состояния, т. е. она одновременно находится во всех этих состояниях *).

Можно задать вопрос, почему тут нет противоречия с законом сохранения энергии, хотя существует постоянная вероятность того, что частица может быть обнаружена в m -м состоянии с энергией, отличной от ее первоначального значения на величину $E_m^0 - E_s^0$. Причина этого заключается в том, что оператор энергии системы теперь равен сумме $(H_0 + \lambda V)$. Существует небольшая неопределенность в H_0 из-за присутствия других собственных функций H_0 в волновой функции с малыми коэффициентами C_n . Но полная энергия равна точно постоянной $\hbar$, умноженной на частоту колебаний волновой функции, и она также равна

$$E = E_s^0 + \lambda V_{ss}. \quad (18.112a)$$

Система обладает приближенной пространственной волновой функцией

$$f(\mathbf{x}) = U_s(\mathbf{x}) + \lambda \sum_{n \neq s} \frac{U_n(\mathbf{x}) V_{ns}}{E_s^0 - E_n^0}, \quad (18.112b)$$

и оператор полной энергии $H_0 + \lambda V$ имеет определенное собственное значение, несмотря на то, что оператор невозмущенной энергии H_0 не имеет определенного собственного значения. (Конечно, все это справедливо только с точностью до членов первого порядка по λ .) Поэтому функция $f(\mathbf{x})$ и является первым приближением для собственной функции оператора $H_0 + \lambda V$, соответствующей собственному значению $E_s^0 + \lambda V_{ss}$ первого приближения.

Случай вырождения. Если какие-нибудь уровни невозмущенной системы вырождены, то ясно, что независимо от того, насколько медленно включается возмущение, невозможно удовлетворить условию $t > \hbar / (E_s^0 - E_n^0)$. Таким образом, в случае вырожденных уровней приведенная выше трактовка неприменима не только потому, что теория возмущений, как мы видели, несправедлива для бесконечно большого времени, но еще и потому, что нельзя применить условие адиабатичности. Случай вырождения будет разобран в гл. 19.

52. Возмущение волновых функций стационарного состояния. Мы видели, что если возмущение включается очень медленно, то в результате возникнет возмущенное стационарное состояние. Хотя

*) Как указывалось в п. 9, пока между $U_n(\mathbf{x})$ существуют определенные фазовые соотношения, нельзя считать правильным, что система находится в определенном, но неизвестном собственном состоянии оператора H_0 . Наоборот, следует считать, что она обладает потенциальной возможностью проявить определенное значение H_0 при взаимодействии с аппаратурой, которой можно пользоваться для измерения H_0 . Вероятность того, что при таких измерениях будет получено n -е собственное состояние, равна $|C_n|^2$.

метод, которым мы пользовались при определении волновой функции с помощью теории возмущений, зависящей от времени, и является совершенно точным, но он несколько громоздок. В этом пункте будет изложен другой метод решения той же задачи, путем непосредственного определения не зависящих от времени собственных функций гамильтониана $H_0 + \lambda V$ с помощью теории возмущений. Этот метод по сравнению с методом, зависящим от времени, более систематически излагает теорию возмущений для стационарных состояний, но физический смысл результатов здесь менее очевиден.

Прежде всего запишем уравнение Шрёдингера для s -й собственной функции:

$$(H_0 + \lambda V)\psi_s = E_s\psi_s.$$

Полная волновая функция, зависящая от времени, равна

$$\psi = \psi_s e^{-iE_s t/\hbar}. \quad (18.113a)$$

Так же как в методе вариации постоянных, выразим функцию ψ в виде ряда по собственным функциям $U_n(\mathbf{x})$ невозмущенного гамильтониана. Так как функция ψ_s является здесь собственной функцией стационарного состояния, то коэффициенты при $U_n(\mathbf{x})$ будут все постоянные:

$$\psi_s = \sum_n C_{ns} U_n(\mathbf{x}). \quad (18.113b)$$

Подстановка (18.113b) в написанное выше уравнение дает

$$(H_0 + \lambda V) \sum_n C_{ns} U_n(\mathbf{x}) = E_s \sum_n C_{ns} U_n(\mathbf{x}).$$

Используя соотношение $H_0 U_n(\mathbf{x}) = E_n^0 U_n(\mathbf{x})$, получаем

$$\sum_n C_{ns} (E_s - E_n^0) U_n(\mathbf{x}) = \sum_n \lambda V C_{ns} U_n(\mathbf{x}).$$

Умножим теперь это уравнение на $U_m^*(\mathbf{x})$ и проинтегрируем по всем $\mathbf{x}$. В силу ортонормировки U_n находим

$$C_{ms} (E_s - E_m^0) = \lambda \sum_n V_{mn} C_{ns}, \quad (18.114)$$

где

$$V_{mn} = \int U_m^*(\mathbf{x}) V U_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Это уравнение аналогично уравнению (18.6), с тем исключением, что C_m здесь постоянные коэффициенты. В общем случае мы имеем бесконечное число линейных уравнений с бесконечным числом независимых переменных. Их надо решить относительно C_{ms} и допустимых значений энергии E_s . Мы будем решать их здесь в предпо-

жении, что λ мало, т. е. ни волновые функции, ни уровни энергии не отличаются сильно от того значения, которое они имели бы, если бы $\lambda = 0$. При $\lambda = 0$ собственные функции были бы точно равны U_s , а собственные значения энергии были бы равны E_s^0 . Следовательно, мы имели бы

$$C_{ms} = \delta_{ms} = \begin{cases} 0, & m \neq s, \\ 1, & m = s; \end{cases}$$

$$E_s = E_s^0.$$

Предположим теперь, что изменения C_{ms} и E_s могут быть выражены в виде ряда по степеням малого параметра λ :

$$\left. \begin{aligned} C_{ms} &= \delta_{ms} + \lambda C_{ms}^{(1)} + \lambda^2 C_{ms}^{(2)} + \dots, \\ E_s &= E_s^0 + \lambda E_s^{(1)} + \lambda^2 E_s^{(2)} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (18.115)$$

Мы видим, что все C_{ms} , кроме C_{ss} , являются величинами первого порядка относительно λ .

Подставляя эти выражения в уравнение (18.114) и объединяя коэффициенты с одинаковыми степенями λ , получим

$$0 = \delta_{ms} [E_s^0 - E_m^0] + \lambda [\delta_{ms} E_s^{(1)} + C_{ms}^{(1)} (E_s^0 - E_m^0) - V_{ms}] +$$

$$+ \lambda^2 [\delta_{ms} E_s^{(2)} + C_{ms}^{(1)} E_s^{(1)} + C_{ms}^{(2)} (E_s^0 - E_m^0) - \sum_n V_{mn} C_{ns}^{(1)}]. \quad (18.116)$$

Коэффициенты при каждой степени λ должны по отдельности равняться нулю. Что коэффициент при (λ^0) равен нулю, ясно, так как величина δ_{ms} равна нулю, за исключением случая, когда $m = s$, а тогда $E_s^0 - E_m^0 = 0$. Это просто выражает собой тот факт, что $U_s(x)$ являются решениями уравнения, когда $\lambda = 0$. Коэффициенты при λ дают следующие соотношения.

Первое приближение:

$$C_{ms}^{(1)} = \frac{V_{ms}}{E_s^0 - E_m^0}, \quad m \neq s; \quad (18.117)$$

$$E_s^{(1)} = V_{ss}. \quad (18.118)$$

Волновая функция первого приближения равна тогда

$$\psi_s = U_s(x) + \lambda C_{ss}^{(1)} U_s(x) + \sum_{n \neq s} \frac{\lambda U_n(x) V_{ns}}{E_s^0 - E_n^0} \quad (18.119)$$

(временная зависимость ψ дается уравнением (18.113а)). Это в точности то же самое выражение, которое было получено в предположении, что возмущающий потенциал включается медленно

(см. уравнение (18.111а)). Энергия в первом приближении равна

$$E_s = E_s^0 + \lambda V_{ss}.$$

Опять это точно то же самое, что мы получали в методе теории возмущения, зависящего от времени (см. уравнение (18.112а)).

Заметим, что уравнения первого приближения не определяют коэффициента $C_{ss}^{(1)}$, так как соотношение, получаемое в предположении, что $m = s$ (уравнение (18.118)), дает нам не $C_{ss}^{(1)}$, а $E_s^{(1)}$. Это означает, что, пока речь идет о первом приближении, $C_{ss}^{(1)}$ может быть произвольной величиной. Можно легко показать, что появление $C_{ss}^{(1)}$ эквивалентно умножению невозмущенной волновой функции на постоянную. Действительно, в каждом из последовательных приближений C_{ss} определяется так, чтобы полная волновая функция была нормирована. Это дает

$$\begin{aligned} 1 = \int \psi_s^* \psi_s d\mathbf{x} &\cong \int \left[(1 + \lambda C_{ss}^{(1)*}) U_s^*(\mathbf{x}) + \lambda \sum_{n \neq s} C_{ns}^{(1)*} U_n^*(\mathbf{x}) \right] \times \\ &\times \left[(1 + \lambda C_{ss}^{(1)} U_s(\mathbf{x}) + \lambda \sum_{n \neq s} C_{ns}^{(1)} U_n(\mathbf{x}) \right] d\mathbf{x} = \\ &= 1 + \lambda (C_{ss}^{(1)*} + C_{ss}^{(1)}) + \text{члены с } \lambda^2. \end{aligned} \quad (18.120)$$

Таким образом, мы получаем $C_{ss}^{(1)*} + C_{ss}^{(1)} = 0$, поэтому с точностью до членов первого порядка по λ $C_{ss}^{(1)}$ должно быть чисто мнимой величиной, которую можно поэтому обозначить через $i\xi$. Тогда

$$C_{ss} = 1 + i\lambda\xi + \text{члены порядка } \lambda^2.$$

Но мы можем также записать $e^{i\lambda\xi} = 1 + i\lambda\xi + \text{члены порядка } \lambda^2$ и, подставляя в выражение (18.113б), получаем

$$\psi_s = e^{i\lambda\xi} U_s(\mathbf{x}) + \sum_{n \neq s} C_{ns} U_n(\mathbf{x}).$$

Это означает, что выбор $C_{ss}^{(1)}$ эквивалентен (с точностью до членов первого порядка по λ) умножению невозмущенной волновой функции $U_s(\mathbf{x})$ на произвольный фазовый множитель. Ясно, что такая процедура не может привести ни к каким наблюдаемым физическим изменениям.

Второе приближение. Если $m \neq s$, то равенство нулю коэффициента при λ^2 дает следующее выражение *):

$$C_{ms}^{(2)} = \frac{1}{E_s^0 - E_m^0} \left(\sum_n V_{mn} C_{ns}^{(1)} - C_{ms}^{(1)} E_s^{(1)} \right).$$

*) Мы могли бы распространить теорию адиабатических возмущений, зависящих от времени (п. 51), до членов второго порядка и получить те же результаты, но процедура эта была бы чересчур громоздкой.

Используя уравнения (18.117) и (18.118) и $C_{ss}^{(1)} = 0$, получаем

$$C_{ms}^{(2)} = \frac{1}{E_m^0 - E_s^0} \left(\sum_{n \neq s} \frac{V_{mn} V_{ns}}{E_n^0 - E_s^0} - \frac{V_{ms} V_{ss}}{E_m^0 - E_s^0} \right). \quad (18.121)$$

Если $m = s$, то из уравнения (18.116) получаем

$$E_s^{(2)} = \sum_{n \neq s} V_{sn} C_{ns}^{(1)} = \sum_{n \neq s} \frac{V_{sn} V_{ns}}{E_s^0 - E_n^0} = \sum_{n \neq s} \frac{|V_{ns}|^2}{E_s^0 - E_n^0}. \quad (18.122a)$$

(Мы используем связь $V_{ns} = V_{sn}^*$, которая следует из эрмитовости оператора V .)

Как и в первом приближении ($C_{ss}^{(1)}$), уравнения второго приближения не определяют коэффициента $C_{ss}^{(2)}$. Как и выше, определим его из требования нормировки волновой функции (на этот раз с точностью до членов второго порядка по λ). Это означает, что

$$1 = \int \left[U_s^* (1 + \lambda^2 C_{ss}^{(2)*}) + \sum_{n \neq s} (\lambda C_{ns}^{(1)*} + \lambda^2 C_{ns}^{(2)*}) U_n^* \right] \times \\ \times \left[U_s (1 + \lambda^2 C_{ss}^{(2)}) + \sum_{n \neq s} (\lambda C_{ns}^{(1)} + \lambda^2 C_{ns}^{(2)}) U_n \right] d\mathbf{x}.$$

Используя свойства нормировки и ортогональности функций U и ограничиваясь только членами порядка λ^2 , получаем

$$1 + \lambda^2 (C_{ss}^{(2)*} + C_{ss}^{(2)}) + \lambda^2 \sum_{n \neq s} |C_{ns}^{(1)}|^2 = 1$$

или

$$C_{ss}^{(2)*} + C_{ss}^{(2)} = - \sum_{n \neq s} \frac{|V_{ns}|^2}{(E_s^0 - E_n^0)^2}. \quad (18.1226)$$

Один из возможных выборов $C_{ss}^{(2)}$ имеет вид

$$C_{ss}^{(2)} = - \frac{1}{2} \sum_{n \neq s} \frac{|V_{ns}|^2}{(E_s^0 - E_n^0)^2}. \quad (18.122в)$$

Можно добавить к $C_{ss}^{(2)}$ произвольную мнимую постоянную, но это просто соответствовало бы смещению по фазе невозмущенной волновой функции, что не имеет существенного физического значения. Поэтому мы ограничимся написанным выше выражением (18.122в) для $C_{ss}^{(2)}$.

Можно последовательно переходить к более высоким порядкам приближений, вычисляя коэффициенты при более высоких степенях λ в уравнении (18.116).

53. Интерпретация формул второго приближения для энергии. Мы видели, что выражения первого приближения для энергии ($E_s^0 + \lambda V_{ss}$) дают как раз среднее значение гамильтониана $H_0 + \lambda V$,

определенное с помощью волновых функций нулевого приближения $U_s(\mathbf{x})$. Покажем теперь, что выражение для энергии во втором приближении равно средней величине гамильтониана, определенного с помощью нормированных волновых функций первого приближения. Это является частным случаем общего правила, гласящего, что $(n+1)$ -е приближение для энергии может быть получено путем усреднения гамильтониана с помощью нормированных волновых функций n -го приближения.

Прежде всего выпишем нормированную волновую функцию первого приближения (выражение (18.119)). Так как функция (18.119) нормирована только до членов первого порядка по λ , то мы должны умножить полную волновую функцию на соответствующий множитель, который обозначим буквой A . Тогда получим

$$\psi_s = A \left[U_s(\mathbf{x}) + \lambda \sum_{n \neq s} \frac{V_{ns} U_n(\mathbf{x})}{E_s^0 - E_n^0} \right], \quad (18.123a)$$

где A — нормировочный коэффициент, определяемый соотношением

$$\begin{aligned} \int |\psi_s|^2 d\mathbf{x} = 1 = |A|^2 \int & \left[U_s^*(\mathbf{x}) + \lambda \sum_{n \neq s} \frac{V_{ns}^* U_n^*(\mathbf{x})}{E_s^0 - E_n^0} \right] \times \\ & \times \left[U_s(\mathbf{x}) + \lambda \sum_{n \neq s} \frac{V_{ns} U_n(\mathbf{x})}{E_s^0 - E_n^0} \right] d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (18.123б)$$

Этот интеграл можно упростить, если принять во внимание нормировку и ортогональность функций $U_n(\mathbf{x})$. Получаем

$$|A|^2 = \frac{1}{1 + \lambda^2 \sum_{n \neq s} \frac{|V_{ns}|^2}{(E_s^0 - E_n^0)^2}}. \quad (18.123в)$$

Заметим, что $|A|^2$ отличается от единицы только членом второго порядка. Если $|A|^2$ разложить в ряд по степеням λ^2 , то получим (до членов второго порядка)

$$|A|^2 \cong 1 - \lambda^2 \sum_{n \neq s} \frac{|V_{ns}|^2}{(E_s^0 - E_n^0)^2}. \quad (18.123г)$$

Следующим этапом является определение среднего значения гамильтониана. Оно равно

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \int \psi_s^* (H_0 + \lambda V) \psi_s d\mathbf{x} = \\ &= \int \psi_s^* E_s^0 \psi_s d\mathbf{x} + \int \psi_s^* (H_0 - E_s^0) \psi_s d\mathbf{x} + \lambda \int \psi_s^* V \psi_s d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (18.124)$$

Так как функция ψ_s нормирована, то первый интеграл в правой части этого уравнения точно равен E_s^0 . Второй интеграл равен (используем равенство $H_0 U_n(x) = E_n^0 U_n(x)$)

$$|A|^2 \int \left[U_s^* + \lambda \sum_{n \neq s} \frac{V_{ns}^* U_n^*}{E_s^0 - E_n^0} \right] \left[(E_n^0 - E_s^0) U_s + \lambda \sum_{n \neq s} \frac{V_{ns} (E_n^0 - E_s^0)}{E_s^0 - E_n^0} U_n \right] d\mathbf{x}. \quad (18.125a)$$

Вследствие нормировки и ортогональности функций $U_n(x)$ этот интеграл равен

$$-|A|^2 \lambda^2 \sum_{n \neq s} \frac{|V_{ns}|^2}{E_s^0 - E_n^0} \cong -\lambda^2 \sum_{n \neq s} \frac{|V_{ns}|^2}{E_s^0 - E_n^0}, \quad (18.125b)$$

если пренебречь членами порядка выше чем λ^2 . Третий интеграл в правой части имеет вид

$$\lambda \int \psi_s^* V \psi_s d\mathbf{x} = |A|^2 \lambda \int \left(U_s^* + \lambda \sum_{n \neq s} \frac{V_{ns}^* U_n^*}{E_s^0 - E_n^0} \right) \times \\ \times V(\mathbf{x}) \left(U_s + \lambda \sum_{n \neq s} \frac{V_{ns} U_n}{E_s^0 - E_n^0} \right) d\mathbf{x}.$$

Пренебрегая членами третьего порядка малости и выше, получаем

$$|A|^2 \left\{ \lambda \int U_s^* V U_s d\mathbf{x} + \lambda^2 \int \sum_{n \neq s} \frac{1}{E_s^0 - E_n^0} \times \right. \\ \times [V_{ns}^* U_n^*(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) U_s(\mathbf{x}) + U_s^*(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) U_n(\mathbf{x}) V_{ns}] d\mathbf{x} \Big\} = \\ = \left[\lambda V_{ss} + 2\lambda^2 \sum_{n \neq s} \frac{|V_{sn}|^2}{E_s^0 - E_n^0} \right] |A|^2 = \lambda V_{ss} + 2\lambda^2 \sum_{n \neq s} \frac{|V_{sn}|^2}{E_s^0 - E_n^0}.$$

Заметим, что с точностью до членов второго порядка малости $A = 1$. Для суммы всех трех интегралов имеем

$$\bar{H} = E_s^0 + \lambda V_{ss} + \lambda^2 \sum_{n \neq s} \frac{|V_{sn}|^2}{E_s^0 - E_n^0}.$$

Но это как раз совпадает со вторым приближением для энергии (уравнение (18.122a)). Последний результат доказывает нашу теорему для случая второго приближения. Аналогичное доказательство может быть получено и для приближений высших порядков.

54. Применение теории возмущений. Разберем теперь несколько примеров применения теории возмущений стационарного состояния к вычислению энергетических уровней атомов. В п. 51 было показано, что эта теория применима, если возмущение включается очень

медленно. Однако той же теорией можно пользоваться и в случае, когда какая-нибудь система достаточно долго существует, прежде чем перейти в устойчивое состояние. Другими словами, энергетические уровни системы, достигнувшей стационарного состояния, должны быть такие же, как и уровни, получающиеся при очень медленном включении возмущения. Этот результат аналогичен подобному же результату в термодинамике, где состояние термодинамического равновесия, достигнутое какой-либо системой по истечении продолжительного времени, такое же, как и состояние, получающееся в результате квазистатического процесса.

1) *Первое приближение для определения энергии в атомах, отличных от атомов водорода.* Первое применение, которое мы рассмотрим, относится к вычислению смещения энергетических уровней в атомах, отличных от атомов водорода. Вспомним, что в поле кулоновской силы энергетические уровни имеют особое вырождение, а именно: уровни с одинаковыми квантовыми числами n , но различными l имеют одну и ту же энергию (гл. 15, п. 13). Самый внешний электрон атомов щелочных металлов движется в силовом поле таком же, как поле атома водорода, пока этот электрон остается вне внутрен-

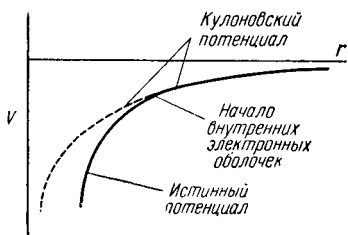


Рис. 82.

них оболочек электронов. Эти оболочки экранируют внешний электрон от большей части заряда ядра. Но если электрон входит во внутренние оболочки, то он уже не экранируется столь эффективно, поэтому потенциал для него оказывается более сильным, чем он был бы для чисто кулоновской силы. Характер такого потенциала схематически изображен на рис. 82. Для более легких щелочных

атомов разницу между действительным и кулоновским потенциалами можно рассматривать как малое возмущение. При переходе к атомам с более высокими атомными номерами это различие становится настолько большим, что его нельзя больше рассматривать как малую поправку.

Тогда для атомов щелочных металлов можно получить некоторое представление об изменении энергетических уровней, написав $V = -\frac{e^2}{r} - \delta V$, где δV — поправка к кулоновскому потенциалу. Заметим, что эту поправку надо брать со знаком минус, потому что влияние неполного экранирования внутренних слоев всегда увеличивает силу, связывающую электрон с ядром. Согласно уравнению (18.118), поправка первого приближения к s -му уровню энергии будет

$$\lambda V_{ss} = - \int U_s^* \delta V U_s dx,$$

где $U_s(x)$ — s -я собственная функция невозмущенного гамильтониана.

Мы видим, что энергия $E_s^{(1)}$ будет большой, если $U_s(x)$ и δV будут велики одновременно в одном и том же месте пространства, а именно при малых радиусах. В гл. 15, п. 8 для волновых функций с одинаковыми n и различными l было показано отличие их, заключающееся в том, что чем больше становится l , тем меньше будет волновая функция вблизи начала координат. Этот эффект, как мы видели, обусловлен центробежным потенциалом, который при больших l удерживает электрон в отдалении от ядра. Следовательно, написанный выше потенциал будет самым большим для наименьшего значения l . Таким образом, больше всего понижается энергетический уровень s -состояния, затем p -состояния и т. д. Это означает, что уровни с одинаковыми n и различными l расщепляются на величину, возрастающую с увеличением отклонения от кулоновской силы, или, другими словами, с увеличением атомного номера. (В классической теории уровни с наименьшими l соответствуют самым глубоко лежащим орбитам.)

2) *Эффект Штарка в атомах, отличных от атомов водорода.* Вычисление энергии с точностью до второго приближения используется при расчете эффекта Штарка в атомах, отличных от атомов водорода. (Для водорода надо проводить специальные вычисления из-за вырождения уровней при одинаковых n и различных l). Эффект Штарка заключается в смещении энергетических уровней во внешнем электрическом поле. Предположим, что это поле направлено вдоль оси z . Тогда возмущающий потенциал, действующий на электрон, равен

$$\lambda V = e\mathcal{E}z,$$

где $\mathcal{E}$ — напряженность электрического поля.

Легко показать, что поправка первого приближения к энергии равна нулю для любого собственного состояния с невозмущенной энергией. Покажем это, записав выражение

$$\lambda V_{ss} = e\mathcal{E} \int U_s^* z U_s dx. \quad (18.126)$$

Произведение $U_s^* U_s$ всегда будет четной функцией z для всякой сферической гармоники $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$. Чтобы доказать это, запишем

$$U_s = f_l(r) P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$$

и

$$|U_s|^2 = |f_l(r)|^2 [P_l^m(\zeta)]^2.$$

Из определения функций P_l^m по уравнению (14.60) мы видим, что эта величина будет четной или нечетной функцией $\zeta = \cos \vartheta = z/r$,

в зависимости от того, будет ли разность $l - m$ четной или нечетной. Таким образом, $[P_l^m(z)]^2$ всегда будет четной функцией z . Это означает, что интеграл в уравнении (18.126) равен нулю, так как подынтегральное выражение всегда нечетное из-за умножения z на четную функцию.

Мы должны теперь вычислить поправку второго приближения к энергии. Для этого воспользуемся уравнением (18.122а). Сначала мы должны вычислить матричные элементы V_{ns} . Из уравнения (18.70) видно, что z_{ns} равно нулю всегда, за исключением состояний, для которых $m' = m$ и $\Delta l = \pm 1$. В результате только эти состояния могут что-нибудь добавить к энергии, и мы должны суммировать только по этим состояниям. Если l и m являются квантовыми числами рассматриваемого состояния, то

$$E_s^{(2)} = e^2 \mathcal{E}^2 \sum_{\substack{l' = l \pm 1 \\ m' = m \\ n'}} \frac{|z|_{n', l', m'; n, l, m}^2}{(E_{l, m, n}^0 - E_{l', m', n'}^0)}. \quad (18.127)$$

Из этого уравнения вытекают некоторые интересные следствия.

а) Смещение энергетических уровней пропорционально $\mathcal{E}^2$. Поэтому рассматриваемый эффект называют «квадратичным» эффектом Штарка, в отличие от значительно большего смещения в водороде, которое, как мы увидим в гл. 19, пропорционально первой степени $\mathcal{E}$ из-за вырождения.

б) Чем теснее расположены нулевые уровни $E_{s, l}$, тем больше будет смещение энергии. Следовательно, в более легких атомах щелочных металлов, для которых вырождение снимается с трудом, следует ожидать довольно большого квадратичного эффекта Штарка.

в) $E_s^{(2)}$ пропорционально $|z|_{n, l'; s, l}^2$, где

$$z_{n, l'; s, l} = \int U_{n, l'}^* z U_{s, l} dx.$$

Этот интеграл приближенно пропорционален размеру области, в которой функции $U_{s, l}$ и $U_{n, l'}$ велики, поэтому квадратичный эффект Штарка возрастает, примерно как квадрат размеров орбиты. Следовательно, он стремится быть больше для орбит с большими n , чем для орбит с меньшими n . Эта зависимость от n в общем случае означает, что два уровня, участвующих в переходе, будут иметь различные смещения и что спектральная линия поэтому будет смещена. Последнее смещение позволяет экспериментально наблюдать квадратичный эффект Штарка.

3) *Поляризуемость атомов.* Когда атом помещен во внешнее электрическое поле, то его классическая орбита деформируется. Если поле включается быстро по сравнению с атомными периодами,

то это искажение вызывает «дрожание» орбиты, причем в общем случае влияние его очень сложное (см. гл. 2, п. 14). Однако если поле включается адиабатически, то орбита изменится, но сохранит устойчивую форму. Основным эффектом будет смещение орбиты как целого в направлении электрического поля. Этому смещению будет сопротивляться электрическое поле ядра, которое стремится вернуть орбиту назад в первоначальное положение с центром в ядре. В первом приближении тормозящая сила пропорциональна смещению орбиты. Поляризуемость определяется средним смещением орбиты на единицу напряженности электрического поля:

$$P = \frac{d}{\mathcal{E}}, \quad (18.128)$$

где d — среднее смещение орбиты в направлении электрического поля $\mathcal{E}$.

Характер смещения орбиты в электрическом поле схематически изображен на рис. 83.

В квантовой теории также следует рассматривать среднее значение смещения орбиты, но оно определяется выражением

$$d = \int \psi^* z \psi d\mathbf{x} = \bar{z}, \quad (18.129)$$

где z — величина координаты в направлении электрического поля. Мы уже видели, что $\bar{z}$ равна нулю в отсутствие электрического поля (т. е. для собственной функции невозмущенной энергии). Это и давало нам разумный результат, что изолированный атом не поляризован. Следующей задачей является определение величины d в электрическом поле. Для этого надо воспользоваться выражением возмущенной волновой функции (18.119), тогда

$$d_s = \int \left[U_s^* + \lambda \sum_{n \neq s} \frac{V_{ns}^* U_n^*}{E_s^0 - E_n^0} \right] z \left[U_s + \lambda \sum_{n \neq s} \frac{V_{ns} U_n}{E_s^0 - E_n^0} \right] d\mathbf{x}. \quad (18.130a)$$

Замечая, что $\int U_s^* z U_s d\mathbf{x} = 0$, и ограничиваясь только членами первого порядка, получаем

$$d_s = \lambda \sum_{n \neq s} \frac{1}{E_s^0 - E_n^0} (V_{ns}^* z_{ns} + V_{ns} z_{sn}). \quad (18.130б)$$

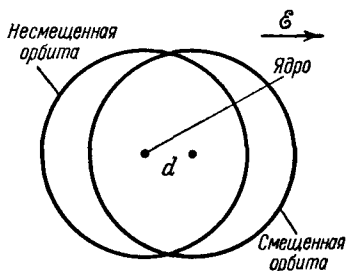


Рис. 83.

Теперь возмущающий потенциал равен $\lambda V = e\mathcal{E}z$. Тогда полученное уравнение принимает вид

$$d_s = 2e\mathcal{E} \sum_{n \neq s} \frac{|z_{sn}|^2}{E_s^0 - E_n^0} \quad (18.130\text{в})$$

и поляризуемость равна

$$P = \frac{d_s}{\mathcal{E}} = 2e \sum_{n \neq s} \frac{|z_{sn}|^2}{E_s^0 - E_n^0}. \quad (18.130\text{г})$$

Мы замечаем, что поляризуемость очень тесно связана со смещением энергетических уровней (уравнение (18.122а)). Действительно, получаем

$$E_s^{(2)} = \frac{e\mathcal{E}^2 P}{2}. \quad (18.131)$$

Получился хорошо известный результат, справедливый для любой системы, в которой поляризация пропорциональна полю.

ВОЗМУЩЕНИЯ В СЛУЧАЕ ВЫРОЖДЕННЫХ СИСТЕМ

1. Введение. Ясно, что если энергетические уровни вырождены, то развитая до сих пор теория возмущений неприменима к возмущениям, длящимся долгое время. Как мы видели, между вырожденными энергетическими уровнями происходят необратимые процессы, т. е. по существу различные вырожденные собственные состояния все перемешаны друг с другом, и неверно предположение, что волновая функция близка к своему первоначальному виду. Аналогично в методе расчета возмущения для стационарных состояний разность энергий в знаменателе уравнения (18.117) равна нулю, и мы опять приходим к выводу, что влияние возмущений может быть велико даже при малых λ .

Проблема возмущений для вырожденных состояний очень важна, так как она возникает во множестве различных систем. Ниже приводится краткий перечень некоторых распространенных видов вырождения, с которыми мы до сих пор встречались.

1) Для свободной частицы энергия зависит только от абсолютной величины импульса ($E = p^2/2m$), а не от направления. Это вырождение снимается (по крайней мере частично) в присутствии потенциала.

2) При сферически симметричном потенциале энергия вырождена по отношению к изменению компоненты z (или какой-либо другой компоненты) момента количества движения, если предположить, что полный момент $\sqrt{L^2}$ постоянен. Это вырождение снимается, если сделать гамильтониан зависящим от угла, т. е. в присутствии внешнего электрического поля, другого атома или магнитного поля.

3) В кулоновском поле энергия вырождена по отношению к изменению квантового числа полного момента l , если главное квантовое число n зафиксировано. Это вырождение снимается внешним электрическим полем (эффект Штарка) или отклонением сферического потенциала от кулоновской формы (см. гл. 18, п. 54).

4) В трехмерном гармоническом осцилляторе энергия будет вырождена, если частоты колебаний в направлениях трех главных осей не являются линейно независимыми (см. гл. 15, п. 16).

Как мы будем решать задачу теории возмущений для вырожденных систем? Прежде всего надо пренебречь всеми переходами между невырожденными состояниями и точно решить получившиеся уравнения, принимая во внимание только переходы между состояниями с одинаковой энергией. Это называется решением «нулевого порядка». В следующем приближении нужно воспользоваться решениями «нулевого порядка» и применить к ним, а уже не к первоначальным собственным функциям обычную теорию возмущений. Законность такой процедуры оправдывается тем, что переходы к уровням энергии, отличным от первоначальных, вызывают, как мы видели, сравнительно небольшие изменения в волновой функции. Поэтому сначала целесообразно рассчитать большие эффекты, обусловленные возмущениями вырожденных состояний, а затем рассмотреть сравнительно малые эффекты от возмущений невырожденных состояний.

2. Пример: двукратно вырожденный уровень. Для иллюстрации описываемого метода предположим, что имеется двукратно вырожденный энергетический уровень, для которого невозмущенные собственные функции равны U_1 и U_2 , а общая энергия равна E_0 . Вернемся теперь к уравнению (18.114) и рассмотрим только члены, содержащие U_1 и U_2 , временно пренебрегая всеми другими членами. Мы получим тогда следующие уравнения:

$$\text{или} \quad \left. \begin{aligned} C_1(E_s - E_0) &= \lambda(V_{1,1}C_1 + V_{1,2}C_2) \\ C_1(E_s - E_0 - \lambda V_{1,1}) &= \lambda C_2 V_{1,2}, \end{aligned} \right\} \quad (19.1a)$$

$$\text{или} \quad \left. \begin{aligned} C_2(E_s - E_0) &= \lambda(V_{2,1}C_1 + V_{2,2}C_2) \\ C_2(E_s - E_0 - \lambda V_{2,2}) &= \lambda C_1 V_{2,1}. \end{aligned} \right\} \quad (19.16)$$

Получено два однородных алгебраических уравнения с двумя неизвестными. Решение этой системы существует, если детерминант из коэффициентов при C равен нулю. Замечая, что $V_{2,1} = V_{1,2}^*$, получаем

$$(E_s - E_0 - \lambda V_{1,1})(E_s - E_0 - \lambda V_{2,2}) = \lambda^2 |V_{1,2}|^2. \quad (19.2)$$

Это квадратное относительно E_s уравнение имеет два решения. Конечно, одновременно всегда нужно выбирать только одно из них. Для упрощения предположим, что $V_{1,1}$ и $V_{2,2}$ равны между собой. Такое упрощение не приводит к существенному нарушению общности результатов. В итоге получаем

$$E_s - E_0 - \lambda V_{1,1} = \pm \lambda \sqrt{|V_{1,2}|^2} = \pm \lambda |V_{1,2}|,$$

где

$$V_{1,2} = |V_{1,2}| e^{-i\varphi}. \quad (19.3)$$

Из уравнений (19.1a) и (19.1b) находим

$$\frac{C_2}{C_1} = \pm e^{i\varphi}. \quad (19.4)$$

Нулевое приближение волновых функций дается выражением

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} [U_1(\mathbf{x}) \pm e^{i\varphi} U_2(\mathbf{x})] \left(\frac{1}{\sqrt{2}} - \text{нормировочный фактор} \right). \quad (19.5)$$

Задача 1. Доказать, что написанные выше функции нормированы, если U_1 и U_2 нормированы и ортогональны.

Приближенные значения энергии, соответствующие функциям (19.5), согласно уравнению (19.3), равны

$$E_{\pm} = E_0 + \lambda V_{1,1} \pm \lambda |V_{1,2}|. \quad (19.6)$$

Задача 2. Решить задачу для E и ψ , если $V_{1,1}$ и $V_{2,2}$ не равны.

Обычно принимают, что $\varphi = 0$, поэтому ниже, если не будет специально оговорено, мы будем принимать $\varphi = 0$.

3. Интерпретация полученных результатов. Первый важный результат сводится к тому, что при длительно действующем возмущении приближенные волновые функции претерпевают большое изменение. Действительно, новые стационарные состояния имеют одинаковую смесь состояний U_1 и U_2 , поэтому равновероятно найти систему в любом из невозмущенных собственных состояний.

Вторым важным моментом является то, что два различных стационарных состояния будут иметь различные энергии (если только $V_{1,2}$ не равен нулю; в последнем случае требуется специальный разбор). Поэтому возмущающий потенциал будет обычно снимать вырождение.

4. Важные свойства приближенных решений. Полученные приближенные решения обладают двумя важными свойствами:

1) Решения ортогональны. Для доказательства этого найдем

$$\int \psi_+^*(\mathbf{x}) \psi_-(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} [U_1^*(\mathbf{x}) + U_2^*(\mathbf{x})] [U_1(\mathbf{x}) - U_2(\mathbf{x})].$$

Из нормировки и ортогональности U_1 и U_2 получаем

$$\frac{1}{2} \int (|U_1(\mathbf{x})|^2 - |U_2(\mathbf{x})|^2) d\mathbf{x} = 0.$$

2) Матричные элементы оператора λV между состояниями ψ_+ и ψ_- равны нулю. Для доказательства этого определим

$$V_{+,-} = \frac{1}{2} \int (U_1^* + U_2^*) V (U_1 - U_2) d\mathbf{x} = \frac{1}{2} (V_{1,1} - V_{2,2} - V_{1,2} + V_{2,1}).$$

В нашем случае предполагалось, что $V_{1,1} = V_{2,2}$. Также и $V_{1,2} = V_{2,1}^*$, но так как мы предполагали, что $\varphi = 0$, то $V_{1,2}$ — вещественное число и $V_{1,2} = V_{2,1}$. Отсюда можно заключить, что $V_{+,-} = 0$.

Такой же результат получается и в более общем случае, когда $V_{1,1}$ и $V_{2,2}$ не равны, а также когда $\varphi \neq 0$.

Задача 3. Доказать это утверждение.

5. Более высокие приближения. Теперь можно непосредственно перейти к более высоким порядкам приближений. Вместо того чтобы разлагать произвольную волновую функцию в ряд по $U_n(\mathbf{x})$, можно пользоваться функциями $\psi_{\pm}$, которые должны получиться при решении уравнений (19.1а) и (19.1б) для каждой группы вырожденных уровней. Так как ψ нормированы и ортогональны, то можно воспользоваться теми же рассуждениями, что и для U . Но теперь матричные элементы между функциями ψ , соответствующими той же невозмущенной энергии, равны нулю. Таким образом, когда мы проводим решение для первого приближения волновых функций (уравнение (18.117)), то будут осуществляться только переходы к невырожденным уровням, а потому будет справедлива теория возмущений. Далее, в более высоких приближениях снятие вырождения в нулевом приближении будет означать, что больше не происходит необратимых процессов (с сохранением энергии). Это гарантирует, что малые возмущения создают соответственно малые изменения волновой функции в течение произвольно большого интервала времени, и потому законно применение теории возмущений *).

6. Случай более чем двукратно вырожденных уровней. Если имеются более чем двукратно вырожденные уровни, то расчет ведется тем же способом. В уравнении (18.114) мы начинаем с рассмотрения только тех C , которые соответствуют данной системе вырожденных уровней. Обозначим C через C_i , и пусть E_0 будет их общая невозмущенная энергия. Тогда уравнения принимают вид

$$C_i(E_s - E_0) = \lambda \sum_{j=1}^N V_{ij} C_j \quad \text{или} \quad \sum_{j=1}^N [\lambda V_{ij} - \delta_{ij}(E_s - E_0)] C_j = 0, \quad (19.7)$$

где N — полное число вырожденных уровней. Эти уравнения аналогичны системе уравнений (18.114) с тем исключением, что здесь мы рассматриваем лишь конечное число уравнений с конечным числом неизвестных. Условие разрешимости этих уравнений имеет вид:

$$\text{детерминант } |\lambda V_{ij} - \delta_{ij}(E_s - E_0)| = 0. \quad (19.8)$$

*) Это происходит потому, что энергия $E_n^0 - E_s^0$ в уравнениях (18.112) и (18.119) не равна больше нулю, если для E_n^0 и E_s^0 пользоваться значениями, полученными при снятом вырождении. Ниже $U_n(\mathbf{x})$ обозначим через $u_n(\mathbf{x})$.

Детерминант (19.8) представляет собой уравнение N -го порядка; поэтому оно в общем случае имеет N корней. Эти корни соответствуют N возможным энергиям нулевого порядка. Каждый корень приводит к различным решениям. Следовательно, мы будем иметь N решений, s -е решение можно записать в виде

$$v_s = \sum_j C_{js} u_j(x). \quad (19.9)$$

Покажем теперь, что элементы матрицы оператора λV между любыми двумя состояниями v_s равны нулю, т. е.

$$\lambda \int v_s^* V v_r dx = 0. \quad (19.10a)$$

Для вычисления этого интеграла используем выражения v_s и v_r , определяемые уравнением (19.9). В результате получаем

$$\lambda \int \sum_m \sum_n C_{ms}^* u_m^* V C_{nr} u_n dx = \lambda \sum_m \sum_n C_{ms}^* V_{mn} C_{nr}. \quad (19.10b)$$

Воспользуемся теперь уравнением (19.7), которое для r -го решения дает

$$C_{mr}(E_r - E_0) = \lambda \sum_{n=1}^N V_{mn} C_{nr}. \quad (19.11)$$

Интеграл в уравнении (19.10a) тогда равен

$$(E_r - E_0) \sum_m C_{ms}^* C_{mr} = \lambda \int v_s^* V v_r dx. \quad (19.12)$$

Но в уравнении (19.10b) мы могли бы суммировать по m раньше, чем по n , используя соотношение $V_{mn} = V_{nm}^*$, тогда

$$\sum_m C_{ms}^* V_{mn} = \sum_m C_{ms}^* V_{nm}^* = \frac{(E_s - E_0)}{\lambda} C_{ns}^*.$$

Приравнявая две суммы, получаем

$$(E_s - E_r) \sum_n C_{nr}^* C_{ns} = 0.$$

В общем случае $E_s \neq E_r$, поэтому вырождение снимается. Если это так, то

$$\sum_n C_{nr}^* C_{ns} = 0 \quad (19.13a)$$

и из уравнений (19.10a) и (19.12) имеем

$$\lambda \int v_r^* V v_s dx = 0, \quad (19.13b)$$

что мы и хотели доказать.

Ортогональность функций v_i . Мы хотим также показать, что различные v_i ортогональны. Рассмотрим интеграл

$$\int v_s^* v_r dx = \int \sum_{m, n} C_{ms}^* C_{nr} u_m^* u_n dx = \sum_m C_{ms}^* C_{mr}$$

(вследствие нормировки и ортогональности функций u_m).

Но по уравнению (19.13а) последнее выражение равно нулю, если $r \neq s$, следовательно, v ортогональны.

7. Общее решение для приближений высших порядков. Так как величины v являются линейными комбинациями от u и так как существует столько же независимых значений v , сколько и u , то можно разложить произвольную функцию по v . Поскольку v также и ортогональны, то процедура разложения такая же, как для u . И наконец, так как отсутствуют матричные элементы V между v_i , принадлежащие той же невозмущенной энергии, то теорией возмущений можно пользоваться так же, как было описано для двукратно вырожденных уровней.

8. Решение, зависящее от времени, для частного случая двукратно вырожденных уровней. Весьма поучительно показать, как изменяется волновая функция со временем, когда существует вырождение. Здесь мы рассмотрим частный случай двукратно вырожденных уровней. (Так как переходы между невырожденными уровнями вызывают лишь малые изменения, то интересно рассмотреть лишь переходы между вырожденными уровнями в обоих направлениях.)

Рассмотрим случай, описываемый уравнениями (19.1а) и (19.1б), в предположении, что

$$V_{1,1} = V_{2,2} = 0.$$

Предположим также для простоты, что $\varphi = 0$. Тогда две собственные функции имеют вид

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_1 + u_2) \quad \text{и} \quad v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_1 - u_2). \quad (19.14а)$$

Так как v_1 и v_2 приближенно являются стационарными состояниями, то их изменение со временем можно найти, умножая каждую из этих величин соответственно на $e^{-i(E_0 + \lambda V_{1,2})t/\hbar}$ и $e^{-i(E_0 - \lambda V_{1,2})t/\hbar}$. Тогда зависящая от времени волновая функция принимает вид

$$\psi_1(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_1 + u_2) e^{-i(E_0 + \lambda V_{1,2})t/\hbar}$$

и

$$\psi_2(x, t) = \frac{u_1 - u_2}{\sqrt{2}} e^{-i(E_0 - \lambda V_{1,2})t/\hbar}. \quad (19.14б)$$

Предположим, что в момент $t=0$ волновая функция имеет вид $\psi = u_1(x)$. Как раз такая задача решалась теорией возмущений в гл. 18, п. 3 для невырожденных уровней. Мы можем написать

$$\psi_{t=0} = u_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(v_1 + v_2). \quad (19.15)$$

Для того чтобы найти изменение ψ со временем, нужно умножить v_1 и v_2 по отдельности на частоты, с которыми колеблется каждая из них, как это показано в уравнении (19.14б). Тогда получаем

$$\psi(x, t) = \frac{e^{-iE_0t/\hbar}}{\sqrt{2}}(v_1 e^{-i\lambda V_{1,2}t/\hbar} + v_2 e^{i\lambda V_{1,2}t/\hbar}). \quad (19.16)$$

Исключим теперь v_1 и v_2 в членах с u_1 и u_2 при помощи уравнений (19.14а):

$$\psi = e^{-iE_0t/\hbar} \left(u_1 \cos \frac{\lambda V_{1,2}t}{\hbar} - iu_2 \sin \frac{\lambda V_{1,2}t}{\hbar} \right). \quad (19.17)$$

9. Квантовомеханический «резонанс». Ясно, что при $t=0$ решение (19.17) равно u_1 , а для более поздних моментов времени включается и функция u_2 . Это означает, что имеют место переходы от u_1 к u_2 . Вначале коэффициент перед волновой функцией u_2 линейно растет со временем, как это и предсказывалось теорией возмущений (см. уравнение (18.9а)). Однако затем этот рост отклоняется от линейности, так как становится несправедливой теория возмущений. Тем временем функция u_1 уменьшается. Когда выполняется условие

$$\frac{\lambda V_{1,2}t}{\hbar} = \frac{\pi}{2},$$

то система будет полностью в состоянии u_2 . Затем она возвращается в состояние u_1 и т. д. Этот процесс формально весьма напоминает процесс для системы двух слабо связанных гармонических осцилляторов, находящихся в резонансе. Если один из осцилляторов в начальный момент времени был возбужден, то энергия переходит ко второму и обратно со скоростью, пропорциональной силе связи между осцилляторами. В квантовой задаче амплитуда волны, а потому вероятность, переходит туда и обратно между двумя вырожденными состояниями со скоростью, пропорциональной величине $\lambda V_{1,2}$, которую можно рассматривать как своего рода член связи. Поэтому, когда в системе есть вырожденные собственные состояния, всегда имеется возможность такого явления, которое обычно называют «резонансом». Если существует больше чем два собственных состояния, то резонанс будет сложнее, точно так же как в аналогичном случае более чем двух связанных гармонических

осцилляторов. В обоих случаях «возбуждение» передается между резонирующими системами более или менее сложным образом, зависящим от природы членов связи.

Как было показано в п. 3, когда система находится в стационарном состоянии, волновая функция равна $\psi = (u_1 \pm u_2)/\sqrt{2}$. В этом случае равновероятно найти систему в состоянии 1 или 2. Для того чтобы система находилась в состоянии, соответствующем волновой функции u_1 , необходимо включать в игру две волновые функции ψ_1 и ψ_2 с различными энергиями, чтобы система уже не была больше в стационарном состоянии (см. уравнение (19.17)), вместо этого она непрерывно совершала бы переходы между состояниями u_1 и u_2 . Как мы уже отмечали, это аналогично двум одинаковым маятникам, связанным слабой пружиной (см. рис. 84). Если маятники колеблются

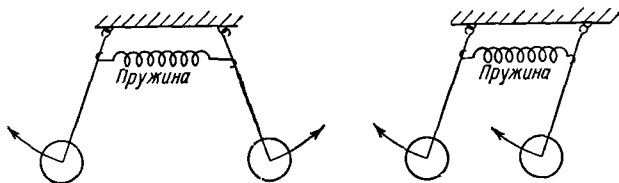


Рис. 84.

в одной и той же или в противоположных фазах, как показано на рисунке, то система находится в состоянии стационарных состояний в том смысле, что каждый маятник сохраняет постоянную энергию. Но если один маятник начинает колебаться, когда другой еще покоится, то начинается непрерывный переход энергии между маятниками.

Если маятники обладают очень различными периодами, то таких резонансных переходов энергии не должно быть, потому что последовательные толчки, передаваемые одним маятником через слабую пружину, очень сильно не попадают в фазу, чтобы иметь возможность создать заметную амплитуду колебаний у другого. Только если два маятника обладают почти одинаковыми периодами, то последовательные импульсы одного будут достигать другого в такой фазе, что в результате после многих колебаний произойдет переход энергии ко второму маятнику. То же происходит и в квантовой теории, где, как мы видели, переходы в состояния с другой энергией меняются на обратные, прежде чем их вероятность станет заметной (см. гл. 18, п. 9), но переходы в состояния с той же энергией приводят к резонансной передаче вероятности от одного состояния к другому. То, что резонанс осуществляется при равных частотах в классической теории и при равных энергиях в квантовой теории, обусловлено просто соотношением де Бройля $E = h\nu$. Действи-

тельно, волновая функция колеблется с частотой $\nu = E/h$, и если две волновые функции имеют одинаковую энергию, то и частоты у них одинаковы. Поэтому резонанс является существенной характеристикой колебательных явлений как в классической, так и в квантовой теории.

Так как между u_1 и u_2 существует определенное фазовое соотношение, появляющееся в уравнении (19.17), то представление о квантовомеханическом резонансе как о переходе вероятности между вырожденными собственными состояниями является неполным, потому что при этом систему нельзя считать находящейся в определенном, но неизвестном собственном состоянии оператора H_0 . (Это ясно следует из того, что существенные физические свойства системы зависят от интерференции между u_1 и u_2 . См. гл. 6 и гл. 16, п. 25.) Вместо этого лучше представить себе, что система обладает потенциальными возможностями для реализации определенного собственного значения величины H_0 при взаимодействии с аппаратурой, которая может быть использована для измерения H_0 . Тогда изменение коэффициентов при u_1 и u_2 в уравнении (19.17) дает изменение вероятностей реализации этих потенциальных возможностей при таком процессе измерения (см. также гл. 22, п. 14).

10. Аналогия задачи возмущения вырожденных состояний с преобразованием к главным осям. Переход от u к v формально весьма сходен с преобразованием к системе главных осей. Рассмотрим, например, неизотропный классический трехмерный гармонический осциллятор. Уравнения движения в произвольных осях имеют вид

$$m\ddot{x}_i = \sum_j a_{ij}x_j, \quad (19.18)$$

где x_i — координаты x, y, z , когда i пробегает соответственно значения 1, 2, 3.

Преобразование к главным осям является линейным преобразованием к новой системе координат ξ_k :

$$x_i = \sum_k \alpha_{ik}\xi_k, \quad (19.19a)$$

и при этом таким, что в новой системе осей уравнения движения принимают простой вид:

$$m\ddot{\xi}_k = b_k\xi_k. \quad (19.196)$$

Другими словами, все новые координаты ξ_k совершают простое гармоническое движение, причем в общем случае каждая координата имеет свой собственный период. ξ_k — координаты вдоль главных осей системы. Главные оси обладают тем свойством, что колебания вдоль них не связаны с колебаниями в других направлениях.

Уравнения для u_i формально очень схожи с уравнениями для x . Можно рассматривать u_i как компоненты вектора в пространстве стольких измерений, сколько имеется энергетических уровней. Тогда преобразования от u к v аналогичны преобразованиям к главным осям в u_i -пространстве*). v_i обладают тем свойством, что они могут колебаться независимо друг от друга, т. е. между ними нет связи.

Приложения теории возмущений вырожденных состояний

11. Эффект Штарка первого порядка. Как мы видели при рассмотрении эффекта Штарка (уравнение (18.70)), матричные элементы энергии возмущения отличны от нуля только при условии $\Delta m = 0$ и $\Delta l = \pm 1$. В водороде состояния с одинаковым n и различными l имеют одинаковую энергию, поэтому нужно пользоваться теорией возмущений для вырожденных состояний. Только для основного состояния ($n = 1$, $l = m = 0$) это вырождение отсутствует.

Исследуем эту задачу для следующего простейшего случая, а именно $n = 2$. При $m = 0$ будут переходы между состояниями с $l = 0$ и $l = 1$. При $m = \pm 1$ таких переходов уже нет, и эти уровни можно описать теорией возмущений для невырожденных состояний.

Обозначим состояние с $l = 0$ через $u_1(x)$, а с $l = 1$, $m = 0$ через $u_2(x)$. Согласно уравнению (18.70), $V_{1,1}$ и $V_{2,2}$ равны нулю для однородного электрического поля, поэтому можно воспользоваться рассуждениями, приведшими к уравнениям (19.5) и (19.6). Энергетический уровень расщепляется тогда на два уровня, определяемые выражением

$$E = E_0 \pm \lambda |V_{1,2}| = E_0 \pm e\mathcal{E} |z_{1,2}|, \quad (19.20)$$

где

$$z_{1,2} = \int u_1^* z u_2 dx.$$

Из этого результата вытекает несколько важных следствий.

1) Смещение энергетических уровней *линейно* зависит от $\mathcal{E}$, в противоположность квадратичному смещению, полученному для невырожденного случая (уравнение (18.127)). Линейное смещение обычно гораздо больше, чем квадратичное смещение, получаемое для большинства атомов. Причина такого линейного смещения энергии обусловлена вырождением, которое приводит к полному изменению волновой функции даже при действии малой возмущающей силы. Изменение энергии пропорционально произведению эффекта изменения волновой функции и изменения гамильтониана. В невырожденном случае оба эти изменения пропорциональны $\mathcal{E}$ (см. уравнения (18.2) и (18.114)), поэтому смещение энергии пропорционально $\mathcal{E}^2$.

*) Преобразования к главным осям и преобразования от u к v являются частными случаями канонического преобразования (см. гл. 16, п. 15).

В случае вырождения полное изменение волновой функции происходит даже при самых слабых возмущениях (см. уравнение (19.5)), так что изменение волновой функции не зависит от $\mathcal{E}$, а полный эффект носит линейный характер относительно $\mathcal{E}$.

2) Сделаем теперь некоторые выводы относительно влияния электрического поля на спектр испускания. Заметим прежде всего, что, за исключением небольшого квадратичного эффекта Штарка, энергетические уровни с $n=1$ и с $n=2$, $l=1$, $m=\pm 1$ не смещаются. Это означает, что те дипольные переходы, в которых $\Delta l = -1$ и $\Delta m = \pm 1$, имеют по существу неизменные частоты. С другой стороны, линия $\Delta l = -1$, $\Delta m = 0$ расщепляется на две линии: одну с несколько большей, другую — с несколько меньшей частотой. Следовательно, в общем случае линия расщепится на три линии. Переходы с $\Delta m = \pm 1$ приводят к поляризации, нормальной к оси z , а с $\Delta m = 0$ — к поляризации вдоль оси z (см. гл. 18, п. 45). Если наблюдать свет вдоль направления электрического поля, то будет заметна лишь поляризация, нормальная к оси z , а, как мы видели, это соответствует переходам с $\Delta m = \pm 1$, т. е. несмещенным линиям. Если свет наблюдается нормально к направлению оси z , то мы получим несмещенную составляющую, поляризованную нормально к электрическому полю, а также две смещенные составляющие, поляризованные вдоль направления электрического поля (см. рис. 85).

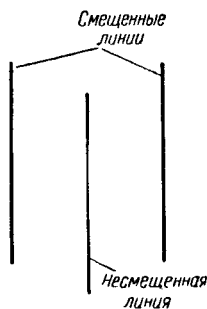


Рис. 85.

Более высокие уровни дадут более сложную картину эффекта Штарка, потому что в общем случае будет участвовать больше вырожденных уровней.

3) Величина смещения зависит от матричного элемента $z_{1,2}$. Эта величина порядка некоторого среднего значения между размерами атома в состояниях 1 и 2. Действительно, она может быть вычислена сравнительно простым способом, и для смещения Штарка при переходе из состояния $l=1$, $m=0$, $n=2$ в состояние $l=0$, $m=0$, $n=1$ имеем

$$\lambda V_{1,2} = 3e\mathcal{E}a_0, \quad (19.21)$$

где a_0 — боровский радиус.

Задача 4. Получить уравнение (19.21).

Эффект Штарка в атомах водорода может быть определен точно при помощи преобразований к параболическим координатам (см., например, [14] и [46]; см. также уравнение (21.94) и соответствующее примечание).

12. Классическая интерпретация линейного эффекта Штарка.

Квантовое вырождение уровней с одинаковым числом n и различными l отражается в классическом вырождении между частотами вращения и радиального колебания. Согласно общему закону сил, эти две частоты отличаются друг от друга (см. гл. 2, п. 14), следовательно, отсутствуют замкнутые орбиты, вместо этого некруговые орбиты прецессируют со скоростью, определяемой разностью радиальной и угловой частот. Только для кулоновской силы эти две частоты становятся равными и получаются замкнутые, непрецессирующие, эллиптические орбиты. Система вырождена относительно направления главной оси эллипса, т. е. не требуется энергии для поворота этой главной оси, пока фокус остается неизменным. Так как среднее положение электрона на его орбите не совпадает с фокусом эллипса, то такой поворот сместит это среднее положение, как показано на рис. 86. Если приложить очень слабое электрическое поле, то орбита

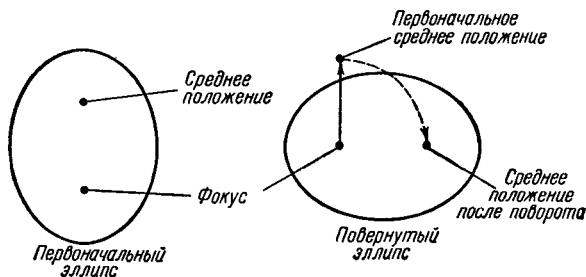


Рис. 86.

будет стремиться вытянуться вдоль направления этого поля. При этом средняя координата электрона будет смещаться на величину d порядка среднего радиуса орбиты. Энергия, связанная с этой деформацией орбиты, равна

$$W = e\mathcal{E}d.$$

Таким образом, первый порядок смещения энергии получается как раз потому, что смещение d не зависит от электрического поля. Самое слабое электрическое поле способно привести к полному смещению. В известном смысле вырожденная система, подобная этой, способна бесконечно поляризоваться.

Задача 5. Рассматривая классическую эллиптическую орбиту, соответствующую $L_z = \hbar$, с энергией, равной энергии квантового состояния с $n = 3$, показать, что смещение для предложенной выше модели будет правильным по порядку величины.

В невырожденной системе нет таких эллиптических орбит; орбита быстро прецессирует, как показано в гл. 2, п. 5. В такой прецес-

сирующей орбите среднее по времени положение электрона находится в центре атома. Если медленно включать слабое электрическое поле, то, как показано в гл. 18, п. 54, орбита слегка смещается в направлении электрического поля. С точки зрения настоящего классического описания такое различие в поведении объясняется тем, что ориентации орбиты в поле препятствует прецессия, стремящаяся возвратить среднее положение электрона назад в центр атома. Результирующая поляризация получается при уравнивании этих двух процессов, в результате которых среднее смещение пропорционально полю $\mathcal{E}$, а потому средняя энергия пропорциональна $\mathcal{E}^2$. По мере приближения к случаю вырождения, т. е. когда радиальная и угловая частоты сближаются, скорость прецессии стремится к нулю. Тогда остается больше времени на ориентацию орбиты вдоль электрического поля, прежде чем эта ориентация нарушится прецессией. Таким образом, по мере приближения атома к вырожденному состоянию его способность к поляризации возрастает.

13. Межатомные ван-дер-ваальсовские силы. Рассмотрим два постепенно сближающихся атома. Пока расстояние между ними остается больше чем диаметр атома, заряд электрона каждого атома стремится экранировать свое собственное ядро, так что в нулевом приближении результирующая сила между атомами отсутствует. Однако если рассмотреть эту задачу более тщательно, то мы можем видеть, что должна существовать небольшая результирующая сила. Это связано с тем, что электроны движутся по орбитам. В результате потенциал, создаваемый любым из данных атомов, претерпевает малые флуктуации. Эти флуктуации создают слабые электрические поля, поляризующие другой атом, и дипольный момент (обозначим его через M). Так как сила, действующая на момент M , равна $F = (M \text{ grad}) \mathcal{E}$, где $\mathcal{E}$ — электрическое поле, а $M = P\mathcal{E}$, где P — поляризуемость, то получаем

$$F = P(\mathcal{E} \text{ grad}) \mathcal{E}.$$

Эта небольшая результирующая сила называется *силой Ван-дер-Ваальса*.

Хотя флуктуирующее электрическое поле $\mathcal{E}$ в среднем равно нулю, но всякий раз, когда электрон совершает один оборот по орбите, сила F , зависящая квадратично от поля $\mathcal{E}$, в среднем по времени не равна нулю. Это связано с тем, что когда поле $\mathcal{E}$ меняет знак, то индуцируемый дипольный момент $M = P\mathcal{E}$ также изменяет свой знак, и поэтому их произведение всегда положительно.

Выясним теперь, как решается такая задача в квантовой механике. Рассмотрим случай одного «валентного электрона». В этом случае остальные электроны настолько сильно связаны с ядром, что они его очень эффективно экранируют, и потому здесь их можно не рассматривать. Тогда эффективный заряд ядра равен единице.

На рис. 87 указаны все координаты, существенные для решения этой задачи: P_1 и P_2 — положения ядер двух атомов, e_1 и e_2 — положения двух электронов, R — расстояние между двумя ядрами, r_1 — расстояние от первого электрона до первого ядра, r_2 — расстояние от второго электрона до второго ядра, R_{12} — расстояние от первого ядра до второго электрона, R_{21} — расстояние от второго ядра до первого электрона, r_{12} — расстояние между электронами.

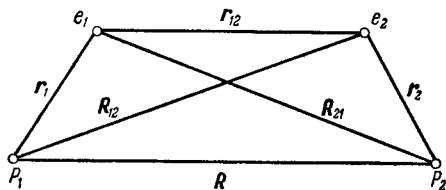


Рис. 87.

В данной задаче можно пренебречь кинетическими энергиями ядер, так как они настолько тяжелы, что могут быть очень точно локализованы с очень маленькой кинетической энергией. Это следует из соотношений неопределенностей $\delta p \cong \hbar/\delta x$ (заметим, что кинетическая энергия равна $T = p^2/2m$), следовательно, $\delta T \cong \hbar^2/2m (\delta x)^2$. Если масса m велика, то требуется очень маленькая кинетическая энергия точной фиксации положения, а потому в первом приближении можно пренебречь кинетической энергией ядра. (Для более подробного ознакомления с этим вопросом отсылаем читателя к работам [47, 48].) Пренебрежение кинетической энергией ядра можно оправдать другим путем, если перейти к классическому пределу и рассматривать орбиты электрона. Электроны движутся настолько быстрее ядер, что они совершат множество оборотов по своим орбитам, прежде чем ядро сможет заметно сместиться. Поэтому можно в первом приближении решать задачу движения электронов в предположении, что ядра неподвижны. Это по существу является так называемым адиабатическим приближением, которое подробно рассматривается в гл. 20.

В принятых предположениях гамильтониан задачи можно записать в таком виде:

$$H = H_1(r_1) + H_2(r_2) + V,$$

где

$$V = e^2 \left[\frac{1}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{R_{12}} - \frac{1}{R_{21}} \right], \quad (19.22)$$

$H_1(r_1)$ — гамильтониан первого электрона в отсутствие второго атома, а $H_2(r_2)$ — гамильтониан второго электрона в отсутствие первого атома.

Если атомы удалены друг от друга, то энергией взаимодействия между ними можно пренебречь. Тогда решение уравнения Шрёдингера имеет вид

$$\psi_{n1, n2} = u_{n1}(r_1) v_{n2}(r_2), \quad (19.23)$$

где $u_{n1}(\mathbf{r}_1)$ представляет собой n_1 -е состояние первого атома, а $v_{n2}(\mathbf{r}_2)$ — n -е состояние второго атома. Атомы не обязательно должны быть одинаковыми. Мы указываем на эту возможность, выбирая различные обозначения для функций u и v . Если оба атома одинаковы, то и u , и v будут одинаковыми функциями. Функции u и v удовлетворяют следующим уравнениям:

$$H_1 u_{n1} = E_{n1}^0 u_{n1} \quad \text{и} \quad H_2 v_{n2} = E_{n2}^0 v_{n2}. \quad (19.24)$$

Из-за существования энергии взаимодействия V волновая функция (19.23) будет изменяться при сближении атомов. Это изменение можно определить с помощью теории возмущения, так как V гораздо меньше, чем потенциал электрона в поле своего ядра. Последнее имеет место, если межатомное расстояние R заметно больше, чем средний диаметр атома, т. е. если выполняются неравенства

$$r_1 \ll R \quad \text{и} \quad r_2 \ll R.$$

Если эти условия выполняются, то приближенно потенциал можно записать в более простом виде. Для этого следует заметить, что V как раз выражает энергию второго атома, которая возникает от потенциала, создаваемого первым атомом. Если и отношение r_1/R , и отношение r_2/R гораздо меньше единицы, то электрический потенциал, создаваемый первым атомом, приближенно равен потенциалу диполя с моментом $\mathbf{M} = -e\mathbf{r}_1$. Потенциал, создаваемый таким диполем в точке $\mathbf{R}$, равен

$$\varphi = -\frac{e\mathbf{r}_1\mathbf{R}}{R^3} = -\frac{e(x_1X + y_1Y + z_1Z)}{R^3}.$$

Электрическое поле находится дифференцированием этого потенциала, т. е.

$$\mathbf{E} = -\text{grad } \varphi.$$

Для нахождения энергии второго атома в поле первого атома примем, что последний эквивалентен диполю с моментом $\mathbf{M} = -e\mathbf{r}_2$. Тогда энергия равна

$$W = e^2 \mathbf{r}_2 \cdot \text{grad} \left(\frac{\mathbf{r}_1\mathbf{R}}{R^3} \right),$$

где дифференцирование проводится по R . Несложные алгебраические преобразования приводят к выражению

$$W = \frac{e^2}{R^3} \left[\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2 - 3 \frac{(\mathbf{r}_1\mathbf{R})(\mathbf{r}_2\mathbf{R})}{R^2} \right]. \quad (19.25)$$

Это и есть первое приближение для V , достаточно хорошее, если $r_1/R \ll 1$ и $r_2/R \ll 1$. Выражение (19.25) представляет собой энергию взаимодействия двух диполей с моментами $\mathbf{M}_1 = -e\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{M}_2 = -e\mathbf{r}_2$, расположенных на расстоянии R друг от друга.

1) *Невырожденный случай.* Если вырождение отсутствует, то задачу можно решать при помощи обычной теории возмущений для невырожденных состояний. При сближении атомов волновые функции искажаются из-за взаимодействия, и возмущенные состояния будут содержать небольшую «примесь» волновых функций, соответствующих более высоким невозмущенным энергиям. Матричные элементы энергии возмущения будут иметь вид

$$V_{n'_1, n'_2; n_1, n_2} = \frac{e^2}{R^3} \int \int u_{n'_1}^*(\mathbf{r}_1) x_1 u_{n_1}(\mathbf{r}_1) v_{n'_2}(\mathbf{r}_2) x_2 u_{n_2}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + \\ + \text{другие подобные члены, содержащие } y_1 y_2 \text{ и } z_1 z_2. \quad (19.26)$$

Но это как раз есть произведение матричных элементов, появляющихся в теории излучения для дипольных переходов (см. гл. 18, п. 25), а также в эффекте Штарка и при поляризуемости атомов (см. гл. 18, п. 54). Чтобы получить выражение для полного матричного элемента, удобно выбрать ось z вдоль линии, соединяющей центры атомов. Тогда из уравнения (19.25) получаем

$$V_{n'_1, n'_2; n_1, n_2} = \frac{e^2}{R^3} (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2)_{n'_1, n'_2; n_1, n_2}. \quad (19.27)$$

Согласно правилам отбора (уравнение (18.70)), переходы возможны только при $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0, \pm 1$. Поэтому лишь уровни, таким образом связанные с невозмущенным состоянием, будут вносить свою долю в энергию. Заметим также, что $V_{n_1, n_2; n_1, n_2} = 0$. Это связано с тем, что, как было показано, среднее значение координаты x равно нулю в любом стационарном состоянии. Поправка к энергии будет поэтому определяться только членами второго порядка (см. уравнение (18.122a)):

$$\Delta E = \frac{e^4}{R^6} \sum_{\substack{n'_1 \neq n_1 \\ n'_2 \neq n_2}} \frac{|(x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2)_{n'_1, n'_2; n_1, n_2}|^2}{E_{n_1}^0 + E_{n_2}^0 - E_{n_1}^0 - E_{n_2}^0}. \quad (19.28)$$

Изменение энергии пропорционально R^{-6} , что находится в хорошем согласии с требуемым для объяснения сил Ван-дер-Ваальса. Причину такой зависимости легко понять. Электрическое поле, обусловленное диполем, пропорционально R^{-3} ; момент диполя, индуцированный в другом атоме, пропорционален этому полю, поэтому энергия, которая пропорциональна произведению этих двух величин, зависит от расстояния, как R^{-6} .

Сумма, входящая в выражение (19.28), очевидно, тесно связана с выражением поляризуемости атома. Сумма будет велика, только когда велики матричные элементы $x_1 x_2$ или когда малы разности энергий в знаменателе. Первый случай осуществляется для больших атомов, второй — для почти вырожденных атомных состояний. У щелочных металлов типа натрия уровни почти вырождены, соответственно их волновые функции примерно такие же, как у водорода, и в них велики силы Ван-дер-Ваальса. Поскольку в благородных газах уровни далеки от вырождения, то наблюдаемая на опыте очень малая величина сил Ван-дер-Ваальса в них хорошо согласуется с показанной выше теоретической картиной.

2) *Случай вырождения. Резонансная передача энергии возбуждения между атомами.* Если два атома различны или если они оба находятся в основном состоянии, то обычно вырождение отсутствует. Но имеется важный случай вырождения, когда атом в возбужденном состоянии подходит близко к такому же атому в основном состоянии. Такой случай может осуществиться, например, если несколько атомов паров натрия или ртути в разрядной трубке возбуждаются электрическим полем или внешним излучением. В результате хаотического молекулярного движения возбужденный атом может приблизиться к невозбужденному. Так как два атома одинаковы, то при передаче энергии от одного атома к другому получается другое состояние с той же самой невозбужденной энергией. Как мы увидим, из такого вырождения следуют многие важные выводы.

При исследовании этого случая мы опять пренебрежем всеми невырожденными переходами, которые обуславливают лишь сравнительно малые эффекты. Пусть ось z совпадает с линией центров двух атомов. Для большей определенности предположим, что основное состояние имеет квантовые числа $n=1$, $l=0$, $m=0$, и рассмотрим только одно возбужденное состояние с $n=2$, $l=1$, $m=0$ (при строгой трактовке нужно учитывать все возбужденные состояния). Тогда, согласно правилам отбора, матричные элементы $x_1 x_2$ и $y_1 y_2$ будут равняться нулю, так как матричные элементы x и y , которые соответствуют излучению, поляризованному в направлении осей x и y , равны нулю при $\Delta m=0$ (см. гл. 18, п. 45). Сохраняется лишь матричный элемент $z_1 z_2$.

Через $\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ обозначим волновую функцию состояния, в котором возбужден первый атом, а через $\psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — волновую функцию состояния, в котором возбужден второй атом. Эти волновые функции равны

$$\psi_1 = u_{1,1,0}(\mathbf{r}_1) u_{0,0,0}(\mathbf{r}_2) = u_1(\mathbf{r}_1) u_0(\mathbf{r}_2), \quad (19.29a)$$

$$\psi_2 = u_{1,1,0}(\mathbf{r}_2) u_{0,0,0}(\mathbf{r}_1) = u_1(\mathbf{r}_2) u_0(\mathbf{r}_1). \quad (19.29b)$$

Единственные существенные матричные элементы, которые не равны нулю, будут

$$V_{1,0;0,1} = -\frac{2e^2}{R^3} z_{1,0} z_{0,1} = -\frac{2e^2}{R^3} |z_{1,0}|^2; \quad V_{0,1;1,0} = -\frac{2e^2}{R^3} |z_{1,0}|^2. \quad (19.30)$$

Применяя теорию возмущений для случая вырождения (см. уравнения (19.5) и (19.6)), получаем для волновых функций

$$\left. \begin{aligned} \psi_a &= \frac{1}{\sqrt{2}} [u_1(\mathbf{r}_1) u_0(\mathbf{r}_2) + u_1(\mathbf{r}_2) u_0(\mathbf{r}_1)], \\ \psi_b &= \frac{1}{\sqrt{2}} [u_1(\mathbf{r}_1) u_0(\mathbf{r}_2) - u_1(\mathbf{r}_2) u_0(\mathbf{r}_1)]. \end{aligned} \right\} \quad (19.31)$$

Смещение энергии равно

$$E_a = -2e^2 \frac{|z_{1,0}|^2}{R^3} \quad \text{и} \quad E_b = 2e^2 \frac{|z_{1,0}|^2}{R^3}. \quad (19.32)$$

Интерпретация результатов. Мы замечаем, что для волновой функции стационарного состояния (ψ_a) энергия взаимодействия атомов (E_a) отрицательна, а для функции ψ_b — положительна. В обоих случаях она пропорциональна R^{-3} , что отличается от зависимости R^{-6} , полученной для невырожденного случая. Далее, в каждом стационарном состоянии возбуждение появляется в обоих атомах одновременно, поэтому если измеряется энергия, то с равной вероятностью в любом атоме будет обнаружено возбуждение*). С другой стороны, если бы возбужденная энергия приписывалась определенно какому-то одному из атомов в данный момент времени, то, согласно рассуждениям п. 9, существовало бы нестационарное состояние. Для такого состояния возбуждение передавалось бы от атома к атому с частотой

$$\nu = \frac{2e^2 |z_{1,0}|^2}{\hbar R^3}. \quad (19.33)$$

Следовательно, чем ближе атомы подходят друг к другу, тем быстрее совершается между ними этот «резонансный» переход энергии.

*) В стационарном состоянии, где $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 \pm \psi_2)$, следует считать, что каждый атом из-за эффектов интерференции находится одновременно в обоих состояниях. Другими словами, неправильно говорить, что каждый атом всегда находится в определенном, но неизвестном состоянии. Наоборот, следует считать, что состояние каждого атома определено не полностью, но имеет потенциальную возможность стать более определенным при взаимодействии с прибором, измеряющим энергию этого атома (см. гл. 6 и 8 и гл. 16, п. 25).

Эти результаты можно понять, рассматривая аналогичную классическую задачу, в которой сближаются два колеблющихся электрических диполя. Если колебания в фазе (рис. 88), то они притягивают друг друга, но если колебания в противоположной фазе

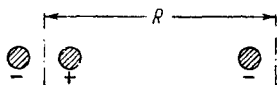


Рис. 88.

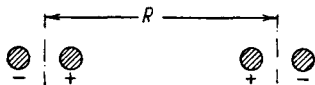


Рис. 89.

(рис. 89), то они отталкиваются. Сила, действующая между ними, пропорциональна R^{-3} , так как электрическое поле каждого атома равно

$$\mathcal{E} = \cos \omega t \operatorname{grad} \frac{M_1 R}{R^3}, \quad (19.34)$$

где M_1 — максимальный момент первого диполя. Энергия взаимодействия равна $W = M_2 \cdot \operatorname{grad} \left(\frac{M_1 R}{R^3} \right) \cos \omega t \cos(\omega t + \varphi)$, где φ — фаза второго осциллятора относительно первого.

Если $\varphi = 0$, то среднее значение W за период отрицательно; если $\varphi = \pi$, то оно положительно. Это показывает более строго, что когда колебания происходят в фазе, то атомы притягиваются, а когда колебания находятся в противоположной фазе, атомы отталкиваются. Закон R^{-3} вытекает из того факта, что, пока осцилляторы находятся в фазе, момент второго не зависит от поля первого, поэтому появляется только член с R^{-3} , проистекающий от поля. (Если частоты осцилляторов были бы различны, то они быстро разошлись бы по фазе и среднее значение доли энергии, зависящей от этого члена, должно было бы равняться нулю. Тогда остался бы только член, зависящий от поляризации второго осциллятора в поле первого, который, как мы видели, пропорционален R^{-6}). Выбирая ось z вдоль расстояния R между двумя диполями, можно при помощи рассуждений, аналогичных тем, которые привели к уравнению (19.25), получить для диполей, колеблющихся только в направлении оси z , следующее выражение:

$$W = - \frac{2M_1 M_2}{R^3} \cos \omega t \cos(\omega t + \varphi).$$

14. Квантовомеханическая аналогия фазы осциллятора. Существует ли квантовомеханическая аналогия фазового соотношения осцилляторов, которая объясняет в классической задаче изменение энергии, пропорциональное R^{-3} ? Чтобы ответить на этот вопрос,

рассмотрим волновую функцию ψ_a . Соответствующая ей плотность вероятности равна

$$P_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = |\psi_a|^2 = \frac{1}{2} |u_1(\mathbf{r}_1)u_0(\mathbf{r}_2) + u_1(\mathbf{r}_2)u_0(\mathbf{r}_1)|^2. \quad (19.35)$$

Если $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$, то оба слагаемых в ψ_a равны; складываясь, они создают большую вероятность. Предположим теперь, что $u_0(\mathbf{r})$ представляет волну s , а $u_1(\mathbf{r})$ — волну p ; s — волна четная, а p — нечетная. Следовательно, если $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ имеют противоположные знаки, то произведение $u_1(\mathbf{r}_1)u_0(\mathbf{r}_2)$ имеет знак, обратный знаку произведения $u_1(\mathbf{r}_2)u_0(\mathbf{r}_1)$. Следовательно, для $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ сумма равна нулю, поэтому вероятность того, что $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ противоположны и равны, равна нулю, и лишь существует малая вероятность, что $\mathbf{r}_1$ близко к $-\mathbf{r}_2$. Итак, мы видим, что точное фазовое соотношение в классической задаче заменяется в квантовой задаче статистическим соотношением. Для волновой функции

$$\psi_b = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_1(\mathbf{r}_1)u_0(\mathbf{r}_2) - u_1(\mathbf{r}_2)u_0(\mathbf{r}_1)]$$

соотношение, очевидно, обратное, так как волновая функция равна нулю, когда $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$, и велика, когда $\mathbf{r}_1 = -\mathbf{r}_2$. Таким образом, мы видим, что ψ_a соответствует статистической тенденции колебаться в фазе. В этом случае и в классической, и в квантовомеханической теории системы притягиваются друг к другу. Функция ψ_b соответствует аналогичной статистической тенденции быть в противоположных фазах и отталкиваться.

Более строго корреляцию можно доказать, вычисляя функцию корреляции для z_1 и z_2 , определяемую величиной $C_{1,1}$ из уравнения (10,4):

$$C_{1,1} = \overline{z_1 z_2} - \overline{z_1} \overline{z_2} = \overline{z_1 z_2}, \quad (19.36a)$$

так как в данном случае $\overline{z_1} = \overline{z_2} = 0$. Получаем

$$C_{1,1} = \frac{1}{2} \int (\psi_1^* \pm \psi_2^*) z_1 z_2 (\psi_1 \pm \psi_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2,$$

далее,

$$\begin{aligned} \int \psi_1^* z_1 z_2 \psi_1 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 &= \int u_1^*(\mathbf{r}_1) z_1 u_1(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 \int u_0^*(\mathbf{r}_2) z_2 u_0(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 = \\ &= \overline{z_1} \overline{z_2} = 0. \end{aligned}$$

Аналогично

$$\int \psi_2^* z_1 z_2 \psi_2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = 0.$$

Остается лишь выражение

$$\begin{aligned} \pm \frac{1}{2} \iint (\psi_1^* \psi_2^* + \psi_2^* \psi_1) z_1 z_2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ = \pm \frac{1}{2} \left[\int u_1^*(\mathbf{r}_1) z_1 u_0(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 \int u_0^*(\mathbf{r}_2) z_2 u_1(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_2 + \right. \\ \left. + \text{комплексно сопряженный член} \right]. \end{aligned}$$

Получаем

$$\overline{C}_{1,1} = \pm |z_{0,1}|^2. \quad (19.366)$$

Мы видим, что для ψ_a , которой соответствует знак плюс, существует положительная корреляция между z_1 и z_2 , а для ψ_b , которой соответствует отрицательный знак, — отрицательная.

15. Экспериментальные следствия вырождения.

1) Сила взаимодействия между возбужденным и невозбужденным атомами должна изменяться, как R^{-3} , и поэтому должна быть значительно более дальнodelствующей, чем силы Ван-дер-Ваальса. Она может быть или притягивающей, или отталкивающей в зависимости от того, какова будет волновая функция (ψ_a или ψ_b). При хаотическом распределении обе функции имеют равные вероятности, поэтому некоторые атомы газа будут притягиваться, а некоторые отталкиваться.

2) Передача возбуждения приводит к очень большому уширению спектральных линий. Это обусловлено тем, что возбуждение передается другому атому, который в общем случае не излучает в фазе с первоначальным атомом. Поэтому время жизни возбужденного состояния первого атома укорачивается, и, согласно соотношению неопределенностей, линии должны уширяться. Уширение линий при таких резонансных переходах в *одинаковых* атомах играет значительно более важную роль, чем уширение, возникающее вследствие эффектов возбуждения второго порядка для других атомов [49, 28, 48, 50].

16. Обменное вырождение. Важный источник вырождения возникает, когда в системе находится больше чем одна частица данного типа. Например, в атоме гелия существует два электрона. Если эти два электрона поменяются местами, то мы получим волновую функцию, которая, вообще говоря, отлична от первоначальной. Но так как все электроны эквивалентны, то обмен какой-либо пары из них не может изменить энергии системы*). Поэтому обе волновые функции должны соответствовать вырожденным энергетическим уровням.

*) Следствия этого будут подробнее разобраны в пп. 20—29.

Гамильтониан электронов в атоме гелия равен

$$H = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{1,2}}, \quad (19.37)$$

где p_1 и r_1 — соответственно импульс первого электрона и его расстояние от центра ядра; p_2 и r_2 — то же для второго электрона; $r_{1,2}$ — расстояние между двумя электронами:

$$r_{1,2}^2 = (x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2.$$

В первом приближении можно пренебречь членом $e^2/r_{1,2}$, который определяет взаимодействие между электронами. Этот член составляет в среднем около $1/5$ от потенциальной энергии $2e^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right)$, которая учитывается в нулевом приближении. Поэтому он хотя и не особенно мал, но все же достаточно мал, чтобы можно было пользоваться теорией возмущений.

Решение для волнового уравнения нулевого порядка дается выражением

$$\psi_{ab} = u_a(\mathbf{r}_1) u_b(\mathbf{r}_2) \quad \text{при} \quad E = E_a + E_b,$$

где $u_a(\mathbf{r}_1)$ — решение уравнения $\left(\frac{p_1^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1}\right) u_a(\mathbf{r}_1) = E_a u_a(\mathbf{r}_1)$, а $u_b(\mathbf{r}_2)$ — решение соответствующего уравнения для второй частицы.

Если принять во внимание член $e^2/r_{1,2}$, то ψ_{ab} уже не будет больше решением уравнения Шрёдингера. Однако мы можем попытаться получить решение при помощи теории возмущений. Для этого надо разложить ψ в ряд по ψ_{ab} с произвольными коэффициентами C_{ab} :

$$\psi = \sum_{a,b} C_{ab} \psi_{ab} = \sum_{a,b} C_{ab} u_a(\mathbf{r}_1) u_b(\mathbf{r}_2).$$

Так как оба электрона тождественны, то мы знаем, что каждой волновой функции ψ_{ab} соответствует другая функция ψ_{ba} , обладающая такой же невозмущенной энергией, т. е. уровень будет вырожденным.

Тогда любая пара функций, принадлежащая двукратно вырожденному уровню, может быть представлена следующим образом:

$$\psi_{ab} = u_a(\mathbf{r}_1) u_b(\mathbf{r}_2), \quad \psi_{ba} = u_a(\mathbf{r}_2) u_b(\mathbf{r}_1).$$

Ясно, что обе функции отличаются только переменной мест электронов, поэтому такое вырождение называется «обменным вырождением». Очевидно, что оно может осуществляться, только если две частицы тождественны, так как в противном случае энергия, вообще говоря, будет изменяться при обмене частиц.

17. Решение задачи при обменном вырождении. Необходимо прежде всего снять вырождение, т. е. решить уравнения нулевого порядка теории возмущений вырожденных состояний. В противном случае знаменатель в уравнении (18.117) будет равен нулю и теория возмущений неприменима.

Обозначим $u_a(\mathbf{r}_1)u_b(\mathbf{r}_2)$ через ψ_1 и $u_a(\mathbf{r}_2)u_b(\mathbf{r}_1)$ через ψ_2 . В рассматриваемом случае возмущающий член равен $\lambda V = e^2/r_{1,2}$. Выпишем значения матричных элементов:

$$\left. \begin{aligned} \lambda V_{1,1} &= e^2 \int \frac{\psi_1^* \psi_1}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, & \lambda V_{2,2} &= e^2 \int \frac{\psi_2^* \psi_2}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \\ \lambda V_{1,2} &= e^2 \int \frac{\psi_1^* \psi_2}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, & \lambda V_{2,1} &= e^2 \int \frac{\psi_2^* \psi_1}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \end{aligned} \right\} \quad (19.38a)$$

Из соображений симметрии ясно, что $V_{1,1} = V_{2,2}$. Кроме того, можно также доказать, что $V_{1,2} = V_{2,1}$, поскольку

$$\lambda V_{1,2} = e^2 \int \frac{u_a^*(\mathbf{r}_1) u_b(\mathbf{r}_2) u_b(\mathbf{r}_1) u_a(\mathbf{r}_2)}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2.$$

Обмен местами индексов у $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ не меняет значения интеграла, поэтому

$$\lambda V_{1,2} = e^2 \int \frac{u_a^*(\mathbf{r}_2) u_b^*(\mathbf{r}_1) u_b(\mathbf{r}_2) u_a(\mathbf{r}_1)}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \lambda V_{2,1}.$$

Так как $V_{2,1} = V_{1,2}^*$, то, следовательно, $V_{1,2} = V_{1,2}^*$, т. е. $V_{1,2}$ и $V_{2,1}$ — вещественные величины.

Теперь можно приступить к вычислению правильных волновых функций нулевого порядка. Из уравнения (19.5) теперь получаем*)

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 \pm \psi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_a(\mathbf{r}_1) u_b(\mathbf{r}_2) \pm u_b(\mathbf{r}_1) u_a(\mathbf{r}_2)]. \quad (19.38б)$$

18. Симметричные и антисимметричные функции. Функции в уравнении (19.38б) обладают тем свойством, что их надо умножить соответственно или на $+1$, или на -1 каждый раз, когда две частицы меняются местами, т. е. если поменять местами $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$. Первый тип функций называется «симметричным», второй — «антисимметричным». Можно видеть, что в любом случае функция

*) Заметим, что раз $V_{1,2}$ — вещественная величина, то величина $e^{i\varphi}$, входящая в уравнение (19.5), равна или $+1$, или -1 . В любом случае решения для ψ принимают форму, представленную уравнением (19.38б). Однако в п. 19 мы увидим, что величина $V_{1,2}$ всегда положительна для возмущения, содержащего кулоновский потенциал, так что для этого случая имеем $\varphi = 0$.

вероятностей остается неизменной при перемене местами частиц. Это означает, что следующие состояния являются равновероятными:

электрон 1 в состоянии a , электрон 2 в состоянии b ;
электрон 2 в состоянии a , электрон 1 в состоянии b .

Однако в действительности не совсем правильно говорить, что электрон 1 находится в состоянии a , а электрон 2 в состоянии b , и наоборот. Как мы увидим, это объясняется тем, что существенные физические свойства зависят от интерференции между функциями ψ_1 и ψ_2 . Следовательно, лучше считать, что каждый электрон пребывает, в некотором смысле, одновременно в обоих состояниях *).

Частный случай: обе частицы находятся в одинаковом состоянии.

Приходится рассматривать особое решение, когда обе частицы находятся в одинаковом состоянии. В этом случае $u_a = u_b$, поэтому функция $u_a(\mathbf{r}_1)u_b(\mathbf{r}_2)$ автоматически симметрична. С другой стороны, антисимметричная функция тождественно равна нулю. Это означает, что существует только одно состояние и нет вырождения. Например, в основном состоянии атома гелия оба электрона находятся в одинаковых состояниях и существует только один энергетический уровень **). Однако если один из электронов возбужден, в то время как другой остается в основном состоянии, то будет существовать вырождение и энергетический уровень, вообще говоря, расщепится на два, как мы увидим в п. 19.

19. Вычисление энергии. Вычислим теперь энергию в нулевом приближении. Это можно сделать двумя способами. Во-первых, можно воспользоваться уравнением (19.6), написав

$$V_{1,1} = e^2 \int \frac{\psi_1^* \psi_1}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = e^2 \int \frac{|u_a(\mathbf{r}_1)|^2 |u_b(\mathbf{r}_2)|^2}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (19.39a)$$

$$V_{1,2} = e^2 \int \frac{\psi_1^* \psi_2}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = e^2 \int \frac{u_a^*(\mathbf{r}_1) u_b^*(\mathbf{r}_2) u_a(\mathbf{r}_2) u_b(\mathbf{r}_1)}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (19.39b)$$

где ψ_1 и ψ_2 должны определяться с учетом уравнений (19.38a). Тогда в согласии с уравнением (19.6) энергия равна ***)

$$E_{\pm} = E_a + E_b + V_{1,1} \pm V_{1,2}. \quad (19.40)$$

*) В п. 29 мы увидим, что никакому электрону нельзя точно приписать определенное состояние, а наоборот, состояние, занятое каждым электроном, следует рассматривать как нечто неопределенное, что имеет потенциальную возможность стать более определенным при взаимодействии с соответствующей системой.

**) Это есть частный случай принципа запрета Паули, см. п. 26.

***) Мы воспользовались тем, что $V_{1,1} = V_{2,2}$ и что $V_{1,2}$ и $V_{2,1}$ вещественны. Независимо от того, будет ли величина $e^{i\varphi}$, определяемая из уравнения (19.5), равна $+1$ или -1 , результат, полученный в уравнении (19.40), будет правильным. Действительно, мы вскоре увидим, что член $V_{1,2}$ всегда положителен, поэтому мы должны взять $\varphi = 0$. В этой связи см. также п. 17.

Во-вторых, можно получить тот же самый результат, если просто вычислить среднюю энергию, пользуясь точной волновой функцией нулевого приближения

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 \pm \psi_2)$$

из уравнения (19.386). Это дает

$$\begin{aligned} E_{\pm} &= \frac{e^2}{2} \int \frac{(\psi_1^* \pm \psi_2^*)(\psi_1 \pm \psi_2)}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + E_a + E_b = \\ &= \frac{e^2}{2} \int \frac{(\psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2)}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \pm \frac{e^2}{2} \int \frac{(\psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1)}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + E_a + E_b. \end{aligned}$$

Простое вычисление показывает, что эта формула эквивалентна уравнениям (19.39) и (19.40); первый член здесь равен $V_{1,1}$, а второй $\pm V_{1,2}$.

Член $V_{1,1}$ формально является эквивалентом потенциальной энергии взаимодействия между двумя непрерывно распределенными объемными зарядами с плотностями

$$\rho_1 = |u_a(\mathbf{r}_1)|^2,$$

$$\rho_2 = |u_b(\mathbf{r}_2)|^2.$$

т. е.

$$V_{1,1} = \int \frac{\rho_1(\mathbf{r}_1) \rho_2(\mathbf{r}_2)}{r_{1,2}} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (19.41)$$

Эту величину следовало ожидать для средней кулоновской энергии, если бы волновая функция оставалась неизменной при возмущении.

Величина $V_{1,2}$ называется «обменным интегралом», потому что из него можно вычислить изменение энергии $\pm V_{1,2}$, обусловленное обменным вырождением*). В самом общем случае знак и величина $V_{1,2}$ будут зависеть как от формы возмущающего потенциала, так и от невозмущенных функций u_a и u_b . Для рассматриваемого частного случая, в котором возмущающий потенциал обусловлен кулоновским взаимодействием между частицами, как мы вскоре увидим, энергия $V_{1,2}$ всегда положительна.

Физический смысл обменной энергии можно понять, если учесть корреляцию между положениями электронов, которая неизбежно существует как в состоянии с симметричной, так и в состоянии с антисимметричной волновой функцией. Существование таких корреляций будет понятно, если учесть, что для симметричной функции ψ_+ волновая функция максимальна, когда $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$, а для

*) Часть энергии $\pm V_{1,2}$, зависящая от знака, с которым встречаются комбинации ψ_1 и ψ_2 , часто называют «обменной энергией».

антисимметричной функции ψ_- волновая функция равна нулю, когда $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$, и очень мала при $\mathbf{r}_1$, близком к $\mathbf{r}_2$. Таким образом, симметричная волновая функция означает существование необычно *большой* вероятности того, что два электрона будут располагаться близко друг к другу, а антисимметричная функция дает необычно *малую* вероятность для их близкого расположения.

Хотя относительные положения двух электронов и связаны подобным образом, но мы должны указать здесь, что положение каждого электрона относительно ядра не зависит от симметричности или антисимметричности волновой функции. Для доказательства вычислим среднее значение произвольной функции $f(\mathbf{r}_1)$ положения одной из частиц, которую мы будем считать первой. Оно равно

$$\begin{aligned}\bar{f}(\mathbf{r}_1) &= \frac{1}{2} \int (\psi_1^* \pm \psi_2^*) f(\mathbf{r}_1) (\psi_1 \pm \psi_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ &= \frac{1}{2} \int [|u_a(\mathbf{r}_1)|^2 |u_b(\mathbf{r}_2)|^2 + |u_a(\mathbf{r}_2)|^2 |u_b(\mathbf{r}_1)|^2] f(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \pm \\ &\pm \frac{1}{2} \int [u_a^*(\mathbf{r}_1) u_b(\mathbf{r}_1) u_b^*(\mathbf{r}_2) u_a(\mathbf{r}_2) + u_b^*(\mathbf{r}_1) u_a(\mathbf{r}_1) u_a^*(\mathbf{r}_2) u_b(\mathbf{r}_2)] \times \\ &\times f(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2.\end{aligned}$$

В силу ортогональности функций u_a и u_b второй интеграл равен нулю, и поэтому, учитывая нормировку этих функций, получаем

$$\bar{f}(\mathbf{r}_1) = \frac{1}{2} \int [|u_a(\mathbf{r}_1)|^2 + |u_b(\mathbf{r}_1)|^2] f(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (19.42)$$

Полученное выражение точно равно среднему значению функции f , вычисленному для состояний, которые определяются соответственно функциями u_a и u_b . Отсюда видно, что $\bar{f}(\mathbf{r}_1)$ (и, следовательно, среднее положение каждого электрона) не зависит от того, будет ли полная волновая функция симметрична или антисимметрична.

Как же тогда объяснить корреляцию положения электронов, которая связана, как мы видели, с типом симметрии волновой функции? Ответ сводится к тому, что при антисимметричной волновой функции два электрона с большей вероятностью стремятся находиться по разные стороны от ядра, чем иметь случайное распределение, а при симметричной функции существует статистическая тенденция преимущественного нахождения электронов с одной стороны ядер. Так как кулоновская энергия взаимодействия между электронами ($e^2/r_{1,2}$) зависит от расстояния между ними, то при симметричной волновой функции эта энергия должна быть больше, чем при антисимметричной волновой функции. Так как разность энергий между симметричной и антисимметричной волновыми функциями равна $2V_{1,2}$ (см. уравнение (19.40)), то, следовательно, обменный интеграл $V_{1,2}$ положителен для кулоновского потенциала. Кроме

того, мы видим также, что так называемая «обменная энергия» представляет просто часть обычной кулоновской энергии, обусловленной квантовомеханической корреляцией между относительными положениями двух электронов.

Для дальнейшего качественного исследования эффектов обменного вырождения предположим, например, что мы можем поместить один из электронов в возбужденное состояние атома гелия, в то время как другой находится в основном состоянии, тогда суммарная волновая функция первоначально имеет вид $\psi_1 = u_1(r_1)u_0(r_2)^*$). Вследствие возмущения, обусловленного кулоновским взаимодействием между электронами, должна возникнуть возможность перехода в состояние $\psi_2 = u_1(r_2)u_0(r_1)$. В этом состоянии происходит обмен энергией возбуждения между электронами. Через большой промежуток времени новая волновая функция должна сильно отличаться от первоначальной, так как из-за вырождения процесс перехода энергии может быть длительным (см. п. 1). Поэтому в теории возмущений нецелесообразно в качестве исходной использовать невозмущенную волновую функцию. Однако существуют две волновые функции ψ_+ и ψ_- , для которых ток вероятности возбуждения от одного электрона к другому уравнивается равным током в обратном направлении. Эти волновые функции соответствуют стационарным состояниям в нулевом приближении, и потому они могут служить хорошей основой для расчета возмущений высших порядков.

Дальнейшее исследование этих волновых функций будет дано в п. 29 (в связи с этим см. также п. 18).

20. Приближения высших порядков. До сих пор мы рассматривали только снятие вырождения в нулевом приближении. Применение теории возмущения для расчета поправок более высоких приближений, естественно, приведет к дальнейшему изменению волновых функций и энергетических уровней. Оказывается, что возможно получить некоторые выводы о природе этих изменений и без непосредственного детального решения рассматриваемой задачи. Эти выводы основаны на том факте, что если две частицы одинаковы, то полный оператор Гамильтона должен быть симметричной функцией относительно координат каждой частицы. Если бы это было не так, то две частицы нельзя было бы считать тождественными, потому что под тождественностью мы понимаем одинаковое поведение обеих частиц при любом возможном возмущении. Например, в частном случае атома гелия полный гамильтониан действительно симметричен относительно обеих частиц (см. уравнение (19.37)).

В общем случае возмущенная волновая функция будет зависеть от матричных элементов между состояниями нулевого приближения

*) В связи с этим см. п. 29, где будет показано, что такое состояние в действительности никогда не осуществляется из-за требования антисимметричности всех электронных волновых функций.

и другими состояниями. Можно легко показать, что если гамильтониан симметричен, то матричные элементы $V_{mn} = 0$ для любых переходов между симметричными и антисимметричными функциями. Для доказательства рассмотрим матричный элемент

$$\int \psi_+^* V \psi_- d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = I,$$

где ψ_+ — симметричная, а ψ_- — антисимметричная функция. Написанный интеграл берется по $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$, следовательно, он не должен изменяться при перемене местами $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$, так как это просто изменение обозначения независимых переменных интегрирования. Такой обмен местами координат оставляет потенциал $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, а также функцию $\psi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ неизменными, поскольку это симметричные функции. Функция же $\psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ изменяет при этом знак. Поэтому обмен местами частиц изменяет знак подынтегральной функции в целом. Следовательно, мы получаем $I = -I$, что может быть, только если $I = 0$.

Полученный результат означает, что если исходить из определенной симметрии функции нулевого приближения, то последующие волновые функции, полученные для более высоких приближений, должны иметь ту же самую симметрию. Все стационарные состояния системы, содержащей две тождественные частицы, должны поэтому иметь или симметричные, или антисимметричные волновые функции. Следовательно, классификация уровней на симметричные и антисимметричные, полученная вначале в нулевом приближении, сохраняется во всех приближениях.

Другой способ трактовки этой задачи связан с использованием теории возмущений, зависящей от времени. Если функция вначале обладала определенной симметрией и если она подвергается симметричным возмущениям, что имеет место для двух тождественных частиц, то вследствие равенства нулю соответствующих матричных элементов не будет никаких переходов функций в какую-либо другую симметрию. Следовательно, тип симметрии в функции сохраняется на все времена. Таким образом, можно утверждать, что тип симметрии функции является постоянной движения системы тождественных частиц.

21. Влияние спина. До сих пор мы пренебрегали в гамильтониане членами, зависящими от спина (см. уравнение (17.80)). Для проверки допустимости такого приближения следует записать полную волновую функцию в виде произведения пространственной и спиновой функций. Поэтому, если в исходном невозмущенном состоянии задачи не принимаются во внимание ни спиновые, ни другие взаимодействия между электронами, то функция имеет вид

$$\psi_0 = u_a(\mathbf{r}_1) u_b(\mathbf{r}_2) v_m(1) v_n(2), \quad (19.43)$$

где $v_m(1)$ — спиновая функция для первой частицы, $v_n(2)$ — то же для второй, m и n равны или $+1$, или -1 .

Обусловленное кулоновским взаимодействием снятие вырождения приводит к волновым функциям нулевого приближения, которые могут быть симметричными или антисимметричными при обмене двух пространственных координат, но на которые не влияют спиновые волновые функции. Тогда для наших волновых функций получаем

$$\psi = \psi_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) v_m(1) v_n(2). \quad (19.44)$$

Однако кулоновская энергия не включает все виды энергии взаимодействия между электронами, так как в гамильтониан входит еще член, зависящий от спина и представляющий энергию спина (уравнение (17.80)):

$$W_{\text{сп}} = \frac{-e\hbar}{2mc} \left\{ \sigma_1 \left(\mathcal{H}(\mathbf{r}_1) + \left[\frac{\mathbf{p}_1}{2mc} \mathcal{E}(\mathbf{r}_1) \right] \right) + \right. \\ \left. + \sigma_2 \left(\mathcal{H}(\mathbf{r}_2) + \left[\frac{\mathbf{p}_2}{2mc} \mathcal{E}(\mathbf{r}_2) \right] \right) \right\}. \quad (19.45)$$

Здесь $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_2$ — соответственно импульсы первой и второй частиц; $\mathcal{H}(\mathbf{r}_1)$ — напряженность магнитного поля в точке, где находится первая частица; $\mathcal{H}(\mathbf{r}_2)$ — то же для второй частицы; аналогично $\mathcal{E}(\mathbf{r}_1)$ и $\mathcal{E}(\mathbf{r}_2)$ — соответствующие напряженности электрического поля.

Магнитное поле у первой частицы, создаваемое орбитальным движением второй, вычисляется по закону Био — Савара *):

$$\mathcal{H}_{1,0}(\mathbf{r}_1) = - \frac{e}{mc} \left[\mathbf{p}_2 \frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} \right]. \quad (19.46a)$$

Соответствующее магнитное поле, создаваемое спином второй частицы, равно

$$\mathcal{H}_{1,s}(\mathbf{r}_1) = \frac{e\hbar}{2mc} \text{grad}_1 \left(\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \sigma_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2} \right). \quad (19.46b)$$

Полное электрическое поле, действующее на первую частицу, имеет вид

$$\mathcal{E}_1(\mathbf{r}_1) = \frac{Ze\mathbf{r}_1}{r_1^3} - e \frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3}, \quad (19.46b)$$

*) Здесь e означает абсолютное значение заряда.

где Z — атомный номер ядра. Для полной спиновой энергии получаем

$$W_{\text{сп}} = \frac{e^2 \hbar}{2m^2 c^2} \left\{ \sigma_1 \left[p_2 \frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} \right] + \sigma_2 \left[p_1 \frac{(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|^3} \right] \right\} - \\ - \frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2} \left\{ \sigma_1 \operatorname{grad}_1 \left(\frac{\sigma_2 (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} \right) + \sigma_2 \operatorname{grad}_2 \left(\frac{\sigma_1 (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|^3} \right) \right\} - \\ - \frac{Ze^2 \hbar}{4m^2 c^2} \left\{ \frac{\sigma_1 [\mathbf{p}_1 \mathbf{r}_1]}{r_1^3} + \frac{\sigma_2 [\mathbf{p}_2 \mathbf{r}_2]}{r_2^3} \right\} + \\ + \frac{e^2 \hbar}{4m^2 c^2} \left\{ \sigma_1 \left[p_1 \frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} \right] + \sigma_2 \left[p_2 \frac{(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|^3} \right] \right\}. \quad (19.47)$$

Написанный здесь член в гамильтониане стремится возбудить переходы между различными спиновыми состояниями. Среди возможных переходов существуют и такие, при которых две частицы обмениваются спинами. Так как невозмущенная энергия не содержит спина, то, следовательно, эти уровни двукратно вырождены. Снятие вырождения производится таким же путем, как это делалось при учете обмена пространственных координат электронов (уравнения (19.38a)), и аналогично же находим, что точные спиновые волновые функции нулевого приближения имеют вид

$$\left. \begin{aligned} \varphi_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [v_m(1) v_n(2) + v_m(2) v_n(1)], \\ \varphi_- &= \frac{1}{\sqrt{2}} [v_m(1) v_n(2) - v_m(2) v_n(1)], \end{aligned} \right\} \quad (19.48)$$

где φ_+ — симметричная функция при обмене двух спинов, а φ_- — антисимметричная.

Полные волновые функции нулевого приближения, снимающие как пространственное, так и спиновое обменное вырождение, будут тогда равны

$$\psi_{\pm, \pm} = \psi_{\pm} \varphi_{\pm}. \quad (19.49)$$

Интересно рассмотреть свойства симметрии относительно одновременного обмена пространственных и спиновых координат двух электронов. Волновые функции $\psi_{+,+}$ и $\psi_{-,-}$ симметричны по отношению к такому обмену, а другие две, т. е. $\psi_{+,-}$ и $\psi_{-,+}$, антисимметричны.

22. Антисимметричность волновых функций электронов. Из проведенного выше рассмотрения мы вправе ожидать, что возбужденные состояния гелия должны иметь в общем случае четыре уровня. На самом же деле их только два. Этот факт, а также аналогичные рассуждения, проводимые при изучении других атомов, показывают, что не все волновые функции, которые являются решениями уравнения Шрёдингера, действительно существуют в природе. Наоборот, найдено, что все наблюдаемые спектральные линии могут быть пра-

вильно объяснены, если предположить, что в действительности появляются только те волновые функции, которые антисимметричны относительно одновременного обмена спиновых и пространственных координат любых двух электронов. Как мы увидим в п. 26, это правило приводит к принципу запрета Паули. Было найдено, что закону антисимметричности подчиняются не только электроны, но также многие другие элементарные частицы, в том числе нейтроны, протоны и нейтрино. Действительно, каждый тип элементарных частиц характеризуется волновой функцией, которая или всегда антисимметрична при обмене двух частиц, или всегда симметрична*). Не существует особых соотношений симметрии, если обмениваются различные типы частиц.

23. Связь между обменной энергией и спином электрона, обусловленная свойством антисимметричности волновых функций. Для того чтобы удовлетворить требованию волновой антисимметричности, необходимо выбрать или симметричные спиновые и антисимметричные пространственные волновые функции, или антисимметричные спиновые и симметричные пространственные волновые функции. Согласно гл. 17, п. 9, симметричным волновым функциям соответствуют параллельные спины, а антисимметричным функциям — антипараллельные. Поэтому если спины параллельны, то для обменной энергии в уравнении (19.39) надо брать отрицательный знак, в то время как для антипараллельных спинов — положительный. Таким образом, получается, что эта энергия как будто обусловлена взаимодействием спинов, хотя фактически она является результатом связи средней кулоновской энергии со спином. В энергию электрона действительно входит другой член, обусловленный истинным магнитным взаимодействием между спинами (см. уравнение (19.47)), но этот член намного меньше, чем эффективная энергия взаимодействия между спинами, определяемая корреляцией между направлениями спинов и пространственной симметрией волновой функции.

Это эффективное взаимодействие между спинами имеет важные следствия, особенно в спектроскопии и в теории ферромагнетизма. Так, в гелии оно приводит к довольно большому разделению между энергетическими уровнями синглетных и триплетных состояний. Так как в гелии обменный интеграл положителен (см. уравнение (19.39б)), то для триплетного состояния, имеющего антисимметричную

*) Существуют некоторые признаки, что определенные типы частиц, называемые мезонами, могут иметь симметричные волновые функции [17]. Если рассматривать фотоны как эквивалентные частицы, то можно показать, что они также должны иметь симметричные волновые функции [4]. Причина такого общего ограничения только симметричными или антисимметричными волновыми функциями в настоящее время неизвестна, но есть предположение, что это связано с требованиями релятивистской инвариантности [51].

пространственную волновую функцию, энергия меньше, чем для синглетного состояния.

В задаче ферромагнетизма [52] спины электронов соседних атомов стремятся ориентироваться параллельно друг другу и тем самым создают сильное намагничивание, возникающее от совместного действия магнитных моментов всех электронов. Согласно законам статистической механики [15], единственной причиной, обуславливающей термодинамическую устойчивость состояния, в котором все спины параллельны, является меньшая энергия такой системы по сравнению с системой, у которой беспорядочно ориентированы спины. Первые попытки построения теории ферромагнетизма основывались на предположении, что соседние молекулярные магнетики стремятся ориентироваться параллельно, поскольку при такой ориентации освобождается магнитная энергия. Однако давно известно, что магнитная энергия в несколько сотен раз меньше, чем та, которая может обеспечить существование ферромагнитного состояния вплоть до температур в несколько сотен градусов по Цельсию. Чтобы понять, почему это так, надо учесть, что тенденции параллельной ориентации спинов противодействует тепловое движение, которое стремится заставить спины ориентироваться более или менее беспорядочно. При очень высоких температурах эффект этого движения настолько велик, что намагниченность в среднем равна нулю. Однако по мере понижения температуры достигается критическая точка, известная под названием точки Кюри, ниже которой силы, стремящиеся ориентировать спины соседних атомов параллельно, становятся достаточно велики, чтобы превысить эффекты теплового движения, в результате средняя намагниченность перестает равняться нулю. Точку Кюри весьма грубо можно определить как точку, в которой средняя энергия теплового движения kT становится равной энергии, освобождаемой при параллельной ориентации соседних диполей. Поэтому из температуры Кюри можно грубо оценить энергию взаимодействия между диполями и показать, что она намного больше той величины, существование которой можно было бы объяснить с помощью чисто магнитного взаимодействия.

Причина параллельной ориентации соседних спинов была объяснена Гейзенбергом, который первый обратил внимание на тот факт, что если обменный интеграл $V_{1,2}$ положительный, то обменная энергия создает стремление к параллельной ориентации спинов соседних электронов*). Это обусловлено тем, что антисимметричность полной волновой функции электрона требует в уравнении (19.39б) отрицательного знака, если спины двух электронов параллельны, и положительного знака, если они антипараллельны. Таким образом,

) Несколько раньше Гейзенберга этот вопрос был в принципе решен в работе Я. И. Френкеля [86]. — *Прим ред.*

возникает энергия как бы в результате спиновых взаимодействий, но на самом деле она вызвана корреляцией между средней кулоновской энергией и спином. Эта энергия в несколько сотен раз больше, чем энергия магнитного взаимодействия между спинами, и потому достаточно велика, чтобы объяснить наблюдаемые температуры, при которых возникает ферромагнетизм*). Более того, теперь становится понятен тот факт, что лишь определенные вещества являются ферромагнетиками, а именно те, для которых обменный интеграл $V_{1,2}$ положителен. (Если $V_{1,2}$ отрицателен, то энергия системы будет возрастать при параллельной ориентации спинов.)

24. Формальное выражение обменной энергии при помощи спиновых операторов. Эффективные спиновые взаимодействия могут быть формально выражены при помощи спиновых операторов. Из уравнений (17.54) следует, что оператор $\sigma_1\sigma_2$ равен $+1$, когда спины параллельны, и -3 при антипараллельных спинах. Следовательно, оператор

$$P_{1,2} = \frac{(1 + \sigma_1\sigma_2)}{2} \quad (19.50)$$

обладает тем свойством, что он равен $+1$, когда спины параллельны, и -1 при антипараллельных спинах. Поэтому обменную энергию можно записать в виде (см. уравнение (19.40))

$$J_{1,2} = \pm V_{1,2} = (1 + \sigma_1\sigma_2)V_{1,2}. \quad (19.51)$$

Отсюда видно, что обменная энергия зависит от угла между двумя спинами, что формально напоминает выражение энергии магнитного взаимодействия пары диполей, хотя в действительности эта обменная энергия является частью электростатического взаимодействия**).

25. Система из многих электронов. Обобщим теорию на случай системы, имеющей произвольное число электронов. Если обозначить нормированные невозбужденные волновые функции отдельной частицы (зависящие и от пространственных координат, и от спина) через $w_1(x_1)w_2(x_2)\dots w_N(x_N)$, то типичная невозмущенная волновая функция для такой системы равна произведению

$$\psi = w_1(x_1)w_2(x_2)\dots w_N(x_N). \quad (19.52)$$

*) Возможность осуществления очень больших значений намагниченности в ферромагнетиках обусловлена действием больших электростатических сил, способствующих параллельной ориентации всех спинов. В парамагнитных веществах параллельная ориентация спинов является просто результатом сравнительно слабого влияния внешних магнитных полей.

**) Согласно уравнению (19.51), два электрона притягиваются, когда их спины параллельны. Это аналогично поведению двух магнитных диполей, расположенных один за другим ($\rightarrow \rightarrow$). С другой стороны, диполи, помещенные рядом друг с другом ($\rightarrow \nearrow$), обнаруживают противоположное поведение.

Эта волновая функция вырождена в том смысле, что получается одна и та же энергия при обмене любых двух частиц. В общем случае при обмене частиц можно получить $N!$ различных волновых функций, по одной для каждой перестановки частиц между волновыми функциями. Точные волновые функции нулевого порядка, снимающие вырождение, должны быть линейной комбинацией этих $N!$ невозмущенных функций.

Общая задача снятия вырождения довольно сложна. Однако если мы ограничимся случаем электрона, то задача значительно упростится, потому что в этом случае волновая функция должна быть антисимметричной при обмене любых двух частиц. Функция такого рода называется полностью антисимметричной функцией. Слейтер показал, что такая функция представляется детерминантом ([16], стр. 237 или стр. 252 перевода)

$$\psi = \begin{vmatrix} w_1(x_1) & w_2(x_1) & \dots & w_N(x_1) \\ w_1(x_2) & w_2(x_2) & \dots & w_N(x_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ w_1(x_N) & w_2(x_N) & \dots & w_N(x_N) \end{vmatrix}. \quad (19.53)$$

Легко проверить, что это как раз такая функция, которая нам нужна. Прежде всего замечаем, что детерминант равен

$$\sum_P (-1)^P w_1(x_1) w_2(x_2) \dots w_N(x_N),$$

где символ P означает операцию перестановки каких-то двух частиц между волновыми функциями. Знак каждого члена будет «+» или «—» в зависимости от того, имеем ли мы четную или нечетную перестановку. Сумма берется по всем возможным перестановкам. Таким образом, детерминант (19.53) является линейной комбинацией вырожденных собственных функций. Антисимметричность его при обмене любых двух частиц легко доказывается, если учесть, что такой обмен приводит к перемене местами двух строк детерминанта. Хорошо известно, что детерминант изменяет знак при перемене местами двух строк.

Задача 6. Доказать с помощью уравнения Шрёдингера, что если гамильтониан является симметричной функцией пространственных и спинных координат всех частиц, то можно пренебречь переходами в состоянии с другой энергией, и тогда волновая функция, пропорциональная вначале детерминанту Слейтера (19.53), остается пропорциональной ему в течение всего времени.

Из задачи 6 непосредственно вытекает, что обменное вырождение снимается выбором антисимметричной функции. Мы получили линейную комбинацию вырожденных собственных функций, которая не изменяется в нулевом приближении с течением времени.

26. Принцип запрета Паули. Докажем теперь, что вследствие антисимметричности волновых функций два электрона в системе не могут одновременно находиться в одинаковых квантовых состояниях. Этот результат, который известен как принцип запрета Паули, подтверждается экспериментально во всех случаях, которые когда-либо подвергались исследованию. Для доказательства его заметим, что если одинаковы две отдельные электронные волновые функции в детерминанте (19.53), то он равен нулю, так как имеет два одинаковых столбца. Следовательно, для всех не равных нулю полностью антисимметричных волновых функций электроны должны быть в различных квантовых состояниях.

Принцип запрета Паули имеет огромное значение для предсказания атомных энергетических уровней. При его применении заметим, что так как существует только два квантовых состояния спина, то не больше чем два электрона могут иметь данный набор квантовых чисел, эти электроны должны иметь противоположные значения спина. Из этого результата вытекает, например, такое следствие, что в основном состоянии гелия, в котором оба электрона находятся в s -состоянии, они имеют противоположные спины, т. е. полный спин равен нулю. Этот же принцип объясняет хорошо известную структуру электронных оболочек атома. Так, в атоме с большим атомным номером прежде всего заполняется состояние с $n=1$ и $l=0$, и в данном случае заполнение прекращается, когда в оболочке находится всего два электрона. Следующие два электрона могут иметь или $n=2$, $l=0$, или $n=2$, $l=1$, и оба они имеют значительно большую невозмущенную энергию, чем уровень $n=1$. Согласно гл. 18, п. 54, состояние с $l=0$ обычно соответствует состоянию с меньшей энергией, потому что его орбиты лежат глубже. На этом уровне могут быть помещены еще два электрона. Так как существуют еще три уровня с $l=1$ ($m=0, \pm 1$), то на уровне $l=1$, $n=2$ могут поместиться шесть электронов. Тогда опять получается заполненная оболочка и полный спин должен снова равняться нулю. Рассуждая таким образом, можно составить качественное представление об общем характере электронной структуры атомов различных элементов. Конечно, это только нулевое приближение, и для получения более точных сведений об энергетических уровнях требуется знать более точные решения (см., например, [44]).

27. Решение для приближений более высокого порядка. Детерминант Слейтера дает правильные волновые функции нулевого приближения. Так как точная волновая функция также должна быть антисимметрична, то она может быть разложена в ряд по детерминантам Слейтера, соответствующим всем возможным уровням невозмущенной системы.

28. Полностью симметричные волновые функции. Как указывалось в п. 22, все элементарные частицы, у которых волновые функции

не полностью антисимметричны, должны описываться полностью симметричными волновыми функциями. Такая волновая функция выражается

$$\psi = \sum_P P w_1(x_1) w_2(x_2) \dots w_N(x_N). \quad (19.54)$$

Задача 7. Доказать, что эта волновая функция полностью симметрична.

Задача 8. Доказать, что любая полностью симметричная волновая функция ортогональна любой полностью антисимметричной волновой функции.

Задача 9. Доказать, что матричный элемент симметричного гамильтониана между симметричной и антисимметричной волновыми функциями равен нулю.

Если есть только две частицы, то наиболее общая возможная волновая функция должна быть некой линейной комбинацией симметричных и антисимметричных функций. Однако когда частиц больше чем две, то имеются функции промежуточной симметрии, которые также снимают вырождение. Такие функции не являются ни полностью симметричными, ни полностью антисимметричными. Они симметричны относительно некоторых обменов и антисимметричны относительно других. Однако такие функции в действительности не существуют, так как они не удовлетворяют принципу запрета (см., например, задачу 10).

Задача 10. Рассмотрим систему, состоящую из трех одинаковых частиц с невозмущенными волновыми функциями u_1 , u_2 и u_3 и с энергией возмущения в гамильтониане в виде $V(r_{1,2}) + V(r_{2,3}) + V(r_{1,3})$, где $r_{1,2}$ — расстояние между частицами 1 и 2. Решить задачу о снятии вырождения и показать, что получаются три энергетических уровня: первый соответствует полностью симметричной волновой функции, второй — полностью антисимметричной и третий — ряду волновых функций промежуточной симметрии.

29. Неразличимость эквивалентных частиц. В классической физике есть две возможности различать частицы. Прежде всего, можно пользоваться тем, что различные частицы оказывают различное действие. Следовательно, они могут по-разному отражать или рассеивать свет или по-разному реагировать на электрические и магнитные силы. Для того чтобы «отметить» частицу по этому признаку, надо воспользоваться по крайней мере одним свойством, которое характерно именно для данной частицы. Так как все действия частицы определяются гамильтонианом, то надо потребовать, чтобы, по крайней мере в некоторых отношениях, гамильтонианы различных частиц были различны.

Если пара частиц полностью эквивалентна, т. е. если каждая из них имеет одну и ту же форму гамильтониана во всех случаях, то этот способ «отметки» уже непригоден для различения частиц. Однако в классической физике еще можно различать частицы, пользуясь свойством непрерывности их траекторий, потому что это

свойство дает возможность наблюдателю проследить за каждой частицей в отдельности.

В квантовой теории задача различения эквивалентных объектов (типа электронов) значительно сложнее, главным образом из-за волновых свойств материи. Даже если не обращать внимания на ограничения, вытекающие из свойств антисимметрии волновых функций, то не всегда возможно отличить электрон, следуя, например, вдоль его траектории, просто потому, что каждому электрону соответствует волновой пакет конечной ширины. Если эти пакеты перекрываются, то невозможно отличить данный электрон по его траектории. Несмотря на это, если электроны обладают неодинаковыми волновыми функциями, то оказывается возможным различать их по некоторому свойству, отличному от их положения в пространстве, например по импульсу, моменту количества движения или какому-нибудь другому наблюдаемому свойству.

Однако мы сейчас покажем, что если наложить ограничение на волновые функции, потребовав их полной антисимметричности или полной симметричности, то теряет всякий смысл даже само определение различия отдельных электронов. Предположим, например, что мы рассматриваем такой случай, когда первый электрон занимает область пространства вблизи точки $x = x_a$ с волновым пакетом $f(x_1 - x_a)$, а второй расположен около точки $x = x_b$ с волновым пакетом $g(x_2 - x_b)$. Суммарная волновая функция всей этой системы равна

$$\psi_1 = f(x_1 - x_a) g(x_2 - x_b). \quad (19.55)$$

С другой стороны, соответствующая антисимметричная волновая функция имеет вид

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} [f(x_1 - x_a) g(x_2 - x_b) - f(x_2 - x_a) g(x_1 - x_b)]. \quad (19.56)$$

Однако если волновая функция антисимметрична, то не следует приписывать каждый электрон определенному (но неизвестному) пакету, отличному от пакета другого электрона (см. п. 18), потому что существенные физические свойства системы могут зависеть от интерференции между функциями, представляющими состояния, в которых эти два электрона соответственно обменялись местами. Следовательно, плотность вероятности для системы имеет вид

$$P(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \{ |f(x_1 - x_a) g(x_2 - x_b)|^2 + |f(x_2 - x_a) g(x_1 - x_b)|^2 + \\ + [f^*(x_1 - x_a) g(x_1 - x_b) g^*(x_2 - x_b) f(x_2 - x_a) + \\ + \text{комплексно сопряженные члены}] \}. \quad (19.57)$$

Первые два слагаемых в выражении (19.57) представляют собой «классическую вероятность», а остальные характеризуют эффекты

квантовомеханической интерференции. В той мере, в какой эти интерференционные эффекты существенны (например, при определении «обменной энергии», описанной в п. 19), мы не можем считать, что каждый электрон может быть отличен от другого. Так как интерференционные свойства характерны для волновых свойств материи (см. гл. 6), то их можно лучше понять, если описывать двухэлектронную систему как нечто, характеризующееся волной в шестимерном пространстве, чем как пару отдельных частиц. Конечно, если система когда-либо будет вынуждена взаимодействовать с аппаратурой, в результате чего обнаруживаются обе частицы по отдельности, то волновая функция перестанет быть полностью антисимметричной (см. п. 20), и мы тогда сможем различать оба электрона*). Следовательно, такая аппаратура давала бы возможность выявить те потенциальные возможности в системе (см. гл. 6, 8 и гл. 16, п. 25), которые обнаруживали бы меньшее сходство с шестимерной волной и большее сходство с парой индивидуальных частиц. Но так как электроны тождественны при всех взаимодействиях, то эти потенциальные возможности могут быть *никогда* не реализованы, так как требуемая для этого аппаратура фактически не может быть сконструирована.

Отсюда следует, что в состояниях с полностью симметричной или антисимметричной волновой функцией электроны не могут быть различимыми, так как они никогда не действуют как отдельные и индивидуальные объекты, которые в принципе можно было бы различить. В качестве примера, иллюстрирующего это свойство, можно рассмотреть обмен местами совокупностей независимых переменных для двух электронов. При этом получается та же самая волновая функция, только со знаком минус, так что квантовое состояние системы при таком обмене не изменяется. С другой стороны, если электроны были бы отдельными и различимыми объектами, то в результате такого обмена можно было бы получить новое квантовое состояние. В действительности для волновой функции (19.55) обмен переменных электронов приводит к новому квантовому состоянию. Невозможность с помощью обмена переменных частицы создать новое квантовое состояние приводит к важным следствиям в статистической механике [15]: к статистике Бозе — Эйнштейна для частиц с полностью симметричными волновыми функциями и статистике Ферми — Дирака для частиц с полностью антисимметричными волновыми функциями.

*) Двухэлектронная система может действовать совершенно аналогично паре индивидуальных объектов, но только в предположении, что ее волновую функцию можно разделить на произведение независимых волновых функций типа (19.55). См. в этой связи также гл. 22, п. 17.

ВНЕЗАПНЫЕ И АДИАБАТИЧЕСКИЕ ВОЗМУЩЕНИЯ

1. Общая форма адиабатического возмущения. До сих пор мы рассматривали только случай медленно изменяющегося потенциала, когда потенциал настолько мал, что можно пользоваться теорией возмущений (гл. 18, п. 51). Однако можно обобщить это рассмотрение на более общую задачу, в которой потенциал может претерпевать большие изменения, но в течение такого большого промежутка времени, что изменение потенциала за время, равное периоду света, испускаемого при переходе в ближайшее соседнее состояние, мало по сравнению с изменением энергии, происходящим при этом переходе. Точнее, это требование имеет вид

$$\frac{\tau}{(E_s^0 - E_n^0)} \frac{\partial V}{\partial t} \ll 1,$$

где E_s^0 — начальная энергия, E_n^0 — энергия ближайшего соседнего состояния, τ — рассматриваемый период. Так как период света, испускаемого при переходе, равен $\tau = h/(E_s^0 - E_n^0)$, то это условие можно переписать так:

$$\frac{h}{(E_s^0 - E_n^0)^2} \frac{\partial V}{\partial t} \ll 1. \quad (20.1)$$

Основная идея этого приближения заключается в том, что если $\partial V/\partial t$ достаточно мала, чтобы удовлетворить условию (20.1), то волновая функция в любой момент времени почти равна волновой функции, которая должна была бы получиться, если бы производная $\partial V/\partial t$ была равна нулю, а потенциал V был равен своей мгновенной величине.

Для иллюстрации метода предположим, что оператор Гамильтона выражается так:

$$H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, p, t). \quad (20.2)$$

Уравнение Шрёдингера принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H(t) \psi.$$

Таким образом, если $H(t)$ изменяется достаточно медленно, то можно ожидать, что получится хорошее приближение для решения уравнения Шрёдингера в каждый момент времени. При этом предполагается, что H — постоянная величина, равная своему мгновенному значению $H(\theta)$ (θ — значение t в момент, для которого требуется вычислить H). Волновые функции для стационарного состояния, которые получаются, если положить $t = \theta = \text{const}$, должны удовлетворять уравнению

$$H(\theta) u_n(\mathbf{x}, \theta) = E_n(\theta) u_n(\mathbf{x}, \theta). \quad (20.3)$$

Можно предполагать, что если H — медленно изменяющаяся функция θ , то хорошим приближенным решением будет

$$\psi_n = u_n(\mathbf{x}, t) e^{-i \int_0^t \frac{E_n(\theta) d\theta}{\hbar}}. \quad (20.4)$$

Это просто означает, что пространственное изменение волновой функции для момента времени t равно «мгновенной» собственной функции оператора $H(t)$, а угловая частота определяется мгновенным значением $E_n(t)/\hbar$. Физическое значение этого решения будет рассмотрено ниже.

Для доказательства того, что решение (20.4) является хорошим приближением, когда значения $\partial H/\partial t$ малы, заметим, что функции ψ_n образуют полную нормированную и ортогональную систему. Следовательно, точная волновая функция может быть разложена в ряд по функциям ψ_n с коэффициентами C_n , которые в общем случае являются функциями времени:

$$\psi = \sum_n C_n(t) u_n(\mathbf{x}, t) e^{-i \int_0^t \frac{E_n(\theta) d\theta}{\hbar}}.$$

Подставляя эту функцию в уравнение Шрёдингера и используя уравнение (20.3), получаем

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \left(\dot{C}_n u_n + \frac{\partial u_n}{\partial t} C_n \right) e^{-i \int_0^t \frac{E_n(\theta) d\theta}{\hbar}} + \sum_n C_n u_n E_n e^{-i \int_0^t \frac{E_n(\theta) d\theta}{\hbar}} = \\ = \sum_n C_n u_n E_n e^{-i \int_0^t \frac{E_n(\theta) d\theta}{\hbar}}. \end{aligned}$$

После сокращений умножаем это равенство почленно на $u_m^* e^{i \int_0^t \frac{E_m(\theta) d\theta}{\hbar}}$ и интегрируем по всему пространству. Пользуясь нормировкой и ортогональностью функций u_m , получаем

$$\dot{C}_m + \sum_n C_n \int u_m^* \frac{\partial u_n}{\partial t} e^{-i \int \frac{(E_n - E_m) d\theta}{\hbar}} d\mathbf{x} = 0. \quad (20.5)$$

Упростим теперь несколько эти уравнения, исключив путем преобразования член суммы, для которого $n = m$. Для этого покажем прежде всего, что коэффициент этого члена, а именно $\gamma_m(t) = \int u_m^* \frac{\partial u_m}{\partial t} d\mathbf{x}$, является чисто мнимым числом. Чтобы доказать это, воспользуемся условием нормировки $\int u_m^* u_m d\mathbf{x} = 1$. Дифференцирование этого уравнения дает

$$\int \left(u_m^* \frac{\partial u_m}{\partial t} + \frac{\partial u_m^*}{\partial t} u_m \right) d\mathbf{x} = \gamma_m(t) + \gamma_m^*(t) = 0.$$

Из этой формулы видно, что вещественная часть γ_m равна нулю, т. е. можно написать $\gamma_m = i\beta_m$, где β_m — вещественное число. Делаем теперь подстановку:

$$v_m = u_m e^{-i \int_0^t \beta_m(\theta) d\theta}, \quad E'_n = E_n + \beta_n. \quad (20.6)$$

Эта подстановка приводит к уравнениям

$$\dot{C}_m + \sum_{n \neq m} C_n \left(\int v_m^* \frac{\partial v_n}{\partial t} d\mathbf{x} \right) e^{-i \int_0^t (E'_n - E'_m) d\theta} = 0$$

или

$$\dot{C}_m + \sum_{n \neq m} C_n \alpha_{mn} e^{-i \int_0^t (E'_n - E'_m) d\theta} = 0, \quad (20.7)$$

где

$$\alpha_{mn} = \int v_m^* \frac{\partial v_n}{\partial t} d\mathbf{x}. \quad (20.8)$$

Заметим, что приведенная выше подстановка приводит к совокупности функций v_m , которые также нормированы и ортогональны,

поэтому она эквивалентна лишь тривиальному изменению фазы. Эта подстановка приводит также к изменению энергии, которое мало, если H медленно изменяется со временем.

Следующий этап решения заключается в доказательстве того, что если начать с приближенного решения v_n , то коэффициенты других состояний C_m будут оставаться малыми для всех моментов времени. Доказательство начнем с уравнения (20.3)

$$H(t) v_n(t) = E_n(t) v_n(t).$$

Дифференцируя по t , получим

$$\frac{\partial H}{\partial t} v_n + H \frac{\partial v_n}{\partial t} = \frac{\partial E_n}{\partial t} v_n + E_n \frac{\partial v_n}{\partial t}.$$

Умножая на v_m^* (когда $m \neq n$) и интегрируя по всему пространству, получаем

$$\begin{aligned} \int v_m^* \frac{\partial H}{\partial t} v_n d\mathbf{x} + \int v_m^* H \frac{\partial v_n}{\partial t} d\mathbf{x} &= \frac{\partial E_n}{\partial t} \int v_m^* v_n d\mathbf{x} + \\ &+ E_n \int v_m^* \frac{\partial v_n}{\partial t} d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Воспользуемся теперь тем фактом, что оператор H — эрмитов, поэтому во втором члене слева оператор H может действовать на функцию v_m^* , а не на $\partial v_n / \partial t$. Заметим также, что первый член справа исчезает вследствие ортогональности функции v_m и v_n , тогда

$$\int v_m^* \frac{\partial H}{\partial t} v_n d\mathbf{x} = (E_n - E_m) \int v_m^* \frac{\partial v_n}{\partial t} d\mathbf{x}.$$

Используя обозначение (20.8), получаем

$$\alpha_{mn} = \frac{1}{E_n - E_m} \int v_m^* \frac{\partial H}{\partial t} v_n d\mathbf{x}. \quad (20.9)$$

Окончательно находим

$$\dot{C}_m + \sum_{n \neq m} \frac{C_n \int v_m^* \frac{\partial H}{\partial t} v_n e^{-i \int_0^t (E'_n - E'_m) d\theta} d\mathbf{x}}{E_n - E_m} = 0. \quad (20.10)$$

Теперь можно поступать примерно так же, как и в методе вариации постоянных. Предположим, что вначале система находилась в состоянии с такими значениями постоянных: $C_s = 1$ и $C_n = 0$ для $n \neq s$.

Тогда можно получить решение для C_m при помощи ряда последовательных приближений. Для первого приближения находим

$$\dot{C}_{ms} + \frac{\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{ms}}{E_s - E_m} e^{-i \int_0^t \frac{(E'_s - E'_m) d\theta}{\hbar}} = 0, \quad (20.11)$$

где

$$\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{ms} = \int v_m^* \frac{\partial H}{\partial t} v_s d\mathbf{x}.$$

Если E'_s и E'_m — медленно изменяющиеся функции θ , то для любого интервала времени интеграл в показателе степени можно приближенно заменить выражением $(E'_s - E'_m)t/\hbar$. Кроме того, β обычно малая величина, поэтому E'_s и E'_m можно заменить соответственно на E_s и E_m . В результате имеем

$$\dot{C}_{ms} + \frac{1}{(E_s - E_m)} \left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{ms} e^{-i(E_s - E_m)t/\hbar} = 0. \quad (20.12)$$

Для оценки полученного решения можно пренебречь медленным изменением со временем выражения $(\partial H/\partial t)_{ms}$, тогда

$$C_{ms} \cong \frac{\hbar}{i(E_s - E_m)^2} \left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{ms} [e^{-i(E_s - E_m)t/\hbar} - e^{-i(E_s - E_m)t_0/\hbar}]. \quad (20.13)$$

Экспоненциальный множитель в уравнении (20.13) самое большее будет порядка единицы. Следовательно, полная вероятность перехода на m -й уровень будет меньше чем

$$|C_{ms}|^2 \cong \frac{4\hbar^2}{(E_m - E_s)^4} \left| \left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{ms} \right|^2. \quad (20.14)$$

Следовательно, если величина $(\partial H/\partial t)_{ms}$ достаточно мала (т. е. удовлетворяется условие (20.1)), то мы сделаем ничтожно малую ошибку, если пренебрежем величинами $|C_{ms}|^2$ и скажем, что система остается в состоянии $v_s(\mathbf{x}, t)$, хотя само v_s изменяется со временем. Последнее известно как «адиабатическое приближение». Полученный результат формально весьма похож на тот, который получался в методе вариации постоянных (уравнение (18.146)), за исключением того, что величина λv_{ms} здесь заменена на $\frac{\hbar}{E_m - E_s} \left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{ms}$. Отношение $\hbar/(E_s - E_m)$ точно равно периоду τ света, излучаемого при переходе из состояния s в m . Следовательно, выражение

$$\frac{\hbar}{E_s - E_m} \left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{ms} = \frac{\tau}{2\pi} \left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{ms}$$

точно равно матричному элементу изменения H за время $\tau/2\pi$. Тогда условие справедливости адиабатического приближения эквивалентно

требованию, чтобы изменение H за период было мало по сравнению с разностью энергий $E_s - E_m$.

Если это условие выполняется, то выражение (20.4) является хорошим приближением для решения уравнения Шрёдингера.

Приведенный выше критерий можно записать в более удобной форме через угловую частоту $\omega_{ms} = (E_m - E_s)/\hbar$. Чтобы адиабатическое приближение было справедливо, должно выполняться условие

$$\frac{\hbar}{(E_m - E_s)^2} \left(\frac{\partial H}{\partial t} \right)_{ms} = \frac{1}{\hbar \omega_{ms}^2} \left(\frac{\partial H}{\partial t} \right)_{ms} = \frac{\left(\frac{\partial H}{\partial t} \right)_{ms}}{\omega_{ms} (E_m - E_s)} \ll 1. \quad (20.15)$$

2. Интерпретация полученных результатов. Представим себе, что мы медленно изменяем вид потенциальной энергии, которая связывает электрон с ядром. Это можно сделать, например, с помощью сильного внешнего поля или если к рассматриваемому атому медленно приближать другую заряженную частицу. Тогда, как мы видели, волновая функция должна начать медленно искажаться, но квантовое число n остается постоянным. Это связано с тем, что для образования нового квантового состояния надо было бы допустить еще одно колебание волновой функции в области с положительной кинетической энергией, а последнее требует большого изменения энергии (см. гл. 11, п. 12). Так как потенциал изменяется со временем очень медленно, то естественно ожидать, что такого большого изменения волновой функции не произойдет, а наоборот, будет происходить постепенное изменение формы волновой функции, поскольку она приспособляется к изменению потенциала, сохраняя постоянным число узлов. Только если бы потенциал изменялся быстро по сравнению с $\hbar/(E_s - E_n)^2$, то осуществлялись бы переходы в другие квантовые состояния, т. е. в состояния с другим числом узлов волновой функции. Тот же результат получился для случая малых, медленно меняющихся возмущений (гл. 18, п. 51), для которых, как мы видели, в каждый момент времени волновая функция равнялась волновой функции стационарного состояния, соответствующей значению гамильтониана в этот момент времени.

При рассмотрении приближения ВКБ (гл. 12, п. 13) мы показали, что в классическом пределе число узлов волновой функции равно $J/\hbar$, где J — переменная действия. Отсюда следует, что при адиабатическом изменении гамильтониана действие J остается постоянным. Действительно, в классической механике существует хорошо известная теорема, согласно которой в адиабатических процессах действие J остается постоянным [2]. Эренфест из адиабатической инвариантности J впервые доказал, что действие является единственной классической величиной, которая может быть разумно проквантована. Это объясняется тем, что всегда в любой системе можно по-

лучить произвольно медленное изменение гамильтониана, например, прилагая внешнее поле. Если какая-нибудь величина квантуется, то она может изменяться только на минимальное дискретное значение. С другой стороны, энергия системы, наблюдаемая классическими методами, изменяется непрерывно. Единственным способом правильного перехода от квантовой теории к классическому пределу для такой задачи является квантование величины, которая является классической константой при адиабатических изменениях, и определение связи этой величины с непрерывным изменением энергии.

Примером классического адиабатического изменения является медленное укорочение длины колеблющегося маятника. Для простого гармонического движения $J = E/\nu$ (гл. 2, п. 11), где ν — частота. Согласно теореме, что действие J является адиабатическим инвариантом, мы находим, что энергия E пропорциональна частоте ν . Если нить подвеса маятника укорачивается, то энергия маятника при этом возрастает. Это возрастание легко определить, вычисляя работу, затрачиваемую при укорочении нити на преодоление эффекта центробежной силы колеблющегося маятника [3].

3. Примеры адиабатических возмущений. а) *Опыт Штерна — Герлаха. Отклонение атомов в неоднородном магнитном поле.* В гл. 14, п. 16 был рассмотрен опыт Штерна — Герлаха, в котором пучок атомов проходит через неоднородное магнитное поле и испытывает действие отклоняющей силы. При этом мы пренебрегали той возможностью, что магнитное поле может вызвать переходы, в которых изменяется момент количества движения. Однако следует помнить, что в местах, где атом попадает в магнитное поле или покидает его, последнее изменяется и по величине, и по направлению, как это показано на рис. 90.

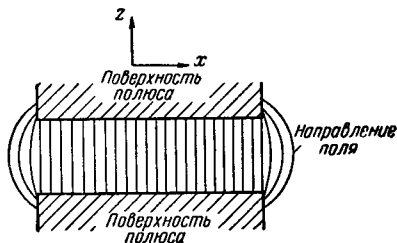


Рис. 90.

Когда атом проходит через край магнита, то он попадает под действие поля, изменяющегося со временем, которое может вызвать переходы с изменением величины составляющей момента количества движения (это мы видели в гл. 18, п.п. 7 и 12, где говорилось о методе вариации постоянных). Если эти процессы начинают играть существенную роль, то обычные выводы, которые делаются из опыта Штерна — Герлаха, становятся неправильными.

Определим те условия, которые должны выполняться, чтобы не происходило заметного числа таких переходов. Это, очевидно, как раз и будут условия адиабатической инвариантности. Другими словами, время, которое атом проводит в области изменения поля,

должно быть большим по сравнению с периодом $\tau = h/(E_n - E_s)$, в течение которого может совершиться процесс перехода. Если частица входит в магнитное поле достаточно медленно, то она будет обладать одной и той же величиной L_z как внутри магнита, создающего поле, так и вне его. Более того, она также и покинет область поля без изменения величины L_z , если и магнитное поле убывает достаточно медленно.

Количественное решение этой задачи начнем с рассмотрения добавочного возмущающего члена, действующего на атом в магнитном поле (см. уравнение (15.52)):

$$\lambda V = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} L,$$

где μ — масса электрона, $\mathcal{H}$ — напряженность магнитного поля, а L — момент количества движения. (Формула справедлива, если мало относительное изменение напряженности магнитного поля $\mathcal{H}$ в объеме атома).

Предположим, что атом движется в направлении оси x , а поле имеет линию симметрии $y=0$ и $z=0$. На этой линии симметрии $\mathcal{H}$ направлено вдоль оси z . Далее предположим, что движение атома в целом может быть описано классически. Это допустимо, поскольку атом настолько тяжел, что квантовые эффекты, вытекающие из соотношения неопределенностей, создают ничтожное изменение скорости (гл. 19. п. 13). Поэтому мы полагаем, что атом движется по траектории, в основном совпадающей с направлением оси x , и что $x=vt$, $y=\text{const}$ и $z=\text{const}$. Конечно, частица испытывает действие малой отклоняющей силы в направлении оси z , но это не создает заметного изменения координаты z , пока частица не выйдет далеко за пределы поля, поэтому таким изменением можно пренебречь.

Напряженность магнитного поля является функцией координат, а так как координаты атома меняются со временем, то $\mathcal{H}$ — функция времени:

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}(x, y, z) = \mathcal{H}(vt, y, z). \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} &= v \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x}. \end{aligned} \right\} \quad (20.16)$$

Мы должны теперь исследовать, может ли изменяющийся потенциал обусловить переходы, при которых изменяется значение L_z , т. е. будет ли переориентация момента количества движения происходить скачком. Начнем со случая частицы, которая движется вдоль линии симметрии. Для такой частицы поле $\mathcal{H}$ остается всегда направленным вдоль оси z , тогда

$$\begin{aligned} \lambda V &= \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} L_z, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\lambda V) &= \frac{ev}{2\mu c} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} L_z. \end{aligned}$$

Для оператора L_z волновые функции $e^{im\varphi}$ являются его собственными функциями, следовательно, матричные элементы, соответствующие изменению m , равны нулю. Заметим, что производная $\partial \mathcal{H} / \partial x$ точно равна численному значению градиента поля в центре атома, поэтому вдоль центральной линии симметрии не будет происходить никаких переходов.

Однако если частица будет иметь какое-то другое значение z , то поле не будет направлено точно вдоль оси z , когда частица войдет в пространство между полюсами магнита. Для получения оценки, например, x -составляющей поля $\mathcal{H}$ как функции z можно разложить $\mathcal{H}_x$ в ряд по степеням z :

$$\mathcal{H}_x \cong (\mathcal{H}_x)_{z=0} + z \left(\frac{\partial \mathcal{H}_x}{\partial z} \right)_{z=0} + \dots$$

где $(\mathcal{H}_x)_{z=0} = 0$, согласно принятому приближению. Так как в вакууме $\text{rot } \mathcal{H} = 0$, то $\frac{\partial \mathcal{H}_x}{\partial z} = \frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial x}$, и тогда

$$\mathcal{H}_x \cong z \left(\frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial x} \right)_{z=0}.$$

Возмущающий член гамильтониана в этом случае принимает вид

$$\lambda V = \frac{e}{2\mu c} (\mathcal{H}_z L_z + \mathcal{H}_x L_x).$$

Мы видели, что $\mathcal{H}_z$ не вызывает переходов к другим значениям m . Однако такие переходы вызывает член с L_x , как можно видеть, например, из гл. 14, п. 10, где $(L_x + iL_y)\psi_m \sim \psi_{m+1}$ и $(L_x - iL_y)\psi_m \sim \psi_{m-1}$. Поэтому матричные элементы L_x для состояний с различными значениями m не равны нулю, а имеют величину порядка $\hbar$. В классической физике это соответствует тому, что z -составляющая $\mathcal{H}$ не влияет на момент вращения от z -составляющей магнитного момента, но x -составляющая поля определенно влияет на составляющую момента в направлении оси z .

Чтобы применить критерий адиабатического движения, надо вычислить

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} (\lambda V) \right]_{ns} \cong \frac{ez}{2\mu c} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_z}{\partial t \partial x} \int \psi_n^* L_x \psi_s d\mathbf{x}.$$

(Интегрирование проводится по координатам электрона в атоме в предположении, что $\mathcal{H}_x$ является приближенно постоянной величиной во всем пространстве, где волновая функция электрона велика, т. е. по объему атома.) Как мы видели, величина этого интеграла оказывается порядка $\hbar$. Из уравнений (20.16) имеем также

$$\frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial t} = v \frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial x}.$$

Поэтому наш матричный элемент будет порядка

$$\frac{\hbar e v z}{2\mu c} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_z}{\partial x^2}.$$

Для проверки критерия применимости адиабатического приближения надо оценить выражение, входящее в условие (20.15):

$$\frac{1}{\hbar} \frac{\left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} \right)_{ns}}{\omega_{ns}^2} \approx \frac{1}{\omega_{ns}^2} \frac{e z v}{2\mu c} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_z}{\partial x^2},$$

где ларморовская частота

$$\omega_{ns} = \frac{E_n - E_s}{\hbar} = \frac{e \mathcal{H}_z}{2\mu c} (m - m') = \frac{e \mathcal{H}_z}{2\mu c}.$$

Тогда условие (20.15) принимает вид

$$\frac{v z}{\omega_{ns}} \left(\frac{\frac{\partial^2 \mathcal{H}_z}{\partial x^2}}{\mathcal{H}_z} \right) \ll 1.$$

Если Δx — расстояние, на котором магнитное поле возрастает от нуля до полного значения $\mathcal{H}_z$, то приближенно можно написать

$$\frac{\partial^2 \mathcal{H}_z}{\partial x^2} \approx \frac{\mathcal{H}_z}{(\Delta x)^2}.$$

Окончательно критерий адиабатической инвариантности может быть записан в такой форме:

$$\frac{v}{\omega_{ns} \Delta x} \frac{z}{\Delta x} \ll 1. \quad (20.17)$$

Смысл написанного неравенства следующий. Величина $v/\omega_{ns} \Delta x$ есть отношение расстояния, проходимого частицей за период ларморовской прецессии, к расстоянию Δx , на котором поле претерпевает основную часть своего изменения. Величина $z/\Delta x$ — отношение среднего расстояния частиц в пучке от линии симметрии к Δx . Отношение $z/\Delta x$ обычно не очень мало, так как расстояние Δx порядка межполюсного расстояния, а линейный размер сечения пучка обычно составляет изрядную долю этого расстояния Δx . Поэтому для справедливости адиабатического приближения практически необходимо, чтобы отношение $v/\omega \Delta x$ было малым.

Для магнитных моментов, вызванных электронами в атоме, имеем

$$\omega = \frac{e \mathcal{H}}{2\mu c} \approx 10^7 \mathcal{H},$$

где $\mathcal{H}$ измеряется в эрстедах. Порядок величины тепловых скоростей — 10^4 см/сек, а Δx — 1 мм, следовательно, $v/\omega \Delta x \approx 10^{-2}/\mathcal{H}$.

Поэтому отношение $v/\omega \Delta x$ легко сделать малым даже при очень слабых полях.

Однако при изучении ядерных магнитных моментов ларморовская частота определяется величиной порядка массы протона. В этом случае отношение $v/\omega \Delta x$ будет порядка $20/\mathcal{H}$, и, очевидно, нужно иметь значительно большие магнитные поля, чтобы сделать это отношение малым.

Связь с кривизной магнитного поля. Если частица движется через магнитное поле, меняющее направление от точки к точке, и если выполняется условие адиабатичности (т. е. направление поля не искривляется слишком быстро), то составляющая оператора L в направлении поля остается постоянной, несмотря на изменение направления поля.

Резонансные скачки момента количества движения в радиочастотных полях. Если условие адиабатичности не выполняется, то получаются переходы между различными составляющими оператора L_z . В некоторых опытах пытались получить такие переходы, используя быстроколеблющееся магнитное поле (радиочастоты) [53] *). Однако мы не будем здесь останавливаться на этом вопросе.

б) *Столкновения молекул газа.* Если два атома газа при столкновении приближаются друг к другу, то возникает важный вопрос: могут ли силы, возникающие при их взаимодействии, вызвать переходы между разными электронными состояниями атомов? Другими словами, может ли кинетическая энергия молекулы превратиться в энергию электронного возбуждения и, наоборот, могут ли возбужденные электроны совершать переходы в основное состояние, превращая свою энергию в кинетическую энергию молекул? Скорости молекул обычно довольно малы (около 10^4 см/сек), а скорости электронов в атомах намного больше (примерно 10^8 см/сек). Поэтому в течение периода оборота электрона в атоме молекула не может далеко продвинуться, и следовательно, энергия взаимодействия при этом изменяется незначительно. Это означает, что столкновение можно обычно рассматривать как адиабатический процесс, в котором электрон остается в своем первоначальном квантовом состоянии. В результате столкновение будет упругим в том смысле, что после того, как оно полностью закончено, электрон не приобретет энергию, но и не потеряет ее на изменение движения молекул. (Этим свойством мы уже пользовались, например, при исследовании природы ван-дер-ваальсовских сил (гл. 19, п. 13), где пренебрегалось влиянием движения молекул.)

Однако существует много случаев, когда это условие адиабатичности не выполняется. Вспомним, что законность адиабатического

) Принципиальная возможность такого типа квантовых переходов была впервые указана еще в 1923 г. Я. Г. Дорфманом [87]. — *Прим. ред.*

приближения требует не только малости $\partial H/\partial t$, но также и того, чтобы разность $E_n - E_s$ не была слишком малой. Если атомы находятся далеко друг от друга, то энергии их электронных состояний обычно довольно широко разделены. Но если атомы приблизить друг к другу, то энергии электронных состояний будут изменяться, поскольку каждый электрон уже находится в суммарном поле сил

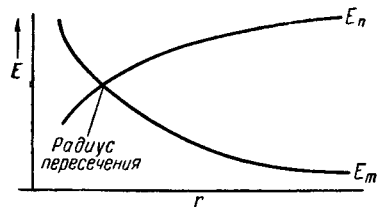


Рис. 91.

обоих атомов. Может случиться, что это изменение будет происходить в направлении сближения энергий уровней электронов, и на некотором расстоянии кривые энергий пересекутся, как это показано на рис. 91. Если частицы сближаются вплоть до такого расстояния пересечения уровней, то возникает большая вероятность обмена

квантовыми состояниями. Тогда после удаления атомов друг от друга они могут оказаться в другом квантовом состоянии. Например, предположим, что один из атомов первоначально был в возбужденном состоянии. Если он сталкивается с другим атомом и если атомы сближаются на расстояние, соответствующее пересечению уровней, то может произойти переход в основное состояние. Затем, когда атомы удалятся друг от друга, электрон может остаться в основном состоянии и энергия электрона должна перейти в кинетическую энергию молекул. Этот процесс известен как «столкновение второго рода» (подробнее см. [48]; [13], стр. 386—403; [28], стр. 243—250; [54], [55]).

в) *Передача энергии от быстрых заряженных частиц к атомам.* Когда тяжелая заряженная частица типа протона или α -частицы пролетает около атома, то сила, возникающая между ней и электронами, может вызвать переход энергии от частицы к электронам и тем самым обусловить возбуждение, или ионизацию, атома. Возникающая потеря энергии замедляет быструю частицу. Очевидно, что после достаточного числа таких переходов быстрая частица придет в состояние покоя. Вероятность таких переходов энергии будет определять средний пробег быстрой частицы в рассматриваемом веществе.

Ясно, что передача энергии в каждом отдельном акте столкновения будет зависеть от того, насколько близко заряженная частица подходит к атому. Мы хотим получить более точное представление о зависимости переходящей энергии от величины минимального расстояния d между быстрой частицей и атомом. Схема поставленной задачи показана на рис. 92.

Остановимся прежде всего на классическом способе описания этого процесса. Сила между заряженной частицей и электроном атома равна Ze^2r/r^3 , где $\mathbf{r}$ — вектор, величина которого равна расстоянию

между электроном и частицей. Эта сила будет большой, только когда заряженная частица находится на расстоянии порядка d вблизи точки максимального сближения; после этого она очень быстро уменьшается с ростом расстояния. Следовательно, если v — скорость частицы, то время, в течение которого может передаваться энергия, будет порядка $d/v = \tau$. Если это время очень мало по сравнению с периодом оборота электрона по своей орбите τ_e , то столкновение закончится прежде, чем атомный электрон может слишком удалиться. Такое столкновение называется «ударным», и оно обычно приводит к заметной передаче энергии электрону. С другой стороны, если расстояние d настолько велико, что $\tau \gg \tau_e$, то электрон совершит много оборотов в течение столкновения. В пределе, при очень продолжительном времени столкновения, орбита электрона адиабатически приспособится к изменению потенциала, возникающему от присутствия тяжелой заряженной частицы. Другими словами, электрон будет двигаться примерно по той же орбите, по которой он бы двигался, если бы тяжелая заряженная частица была закреплена в своем мгновенном положении. Так как тяжелая частица движется, то орбита электрона изменяется медленно и обратимо (т. е. адиабатически), т. е. после столкновения электрон остается на той же орбите, что и перед столкновением. В результате при адиабатическом столкновении не происходит передачи энергии. Так как столкновение становится адиабатическим, когда $d/v > \tau_e$, то, следовательно, столкновения, при которых $d > \tau_e v$, не передают заметных энергий. Этот результат очень важен для вычисления проникающей способности заряженных частиц, проходящих через вещество. Бор детально разработал теорию этой проблемы [56].

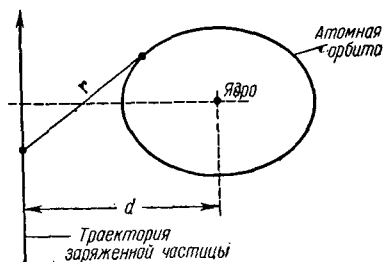


Рис. 92.

Изменение передачи энергии в зависимости от скорости падающей частицы можно также понять следующим образом: на заданном расстоянии d максимального сближения столкновение будет ударным, если частица движется достаточно быстро. Однако чем быстрее частица, тем меньше время передачи импульса. Следовательно, потеря энергии возрастает при замедлении частицы, пока частица не становится столь медленной, что можно применять адиабатическое приближение, и тогда передача энергии начинает уменьшаться. В результате существует некоторая скорость (порядка скоростей электронов в атомах), при которой передача энергии максимальна.

В квантовой теории это явление объясняется примерно таким же образом, с тем лишь исключением, что нужно сравнивать отноше-

ние d/v с величиной $\hbar/(E_n - E_0)$, где E_n и E_0 — атомные энергетические уровни. Но так как $\hbar/(E_n - E_0)$ обычно того же порядка величины, что и классически вычисленные атомные периоды, то классические и квантовомеханические адиабатические условия по существу одинаковы.

4. Внезапное изменение возмущающего потенциала. Во многих случаях мы имеем дело с большими возмущениями, которые, однако, очень быстро возникают по сравнению с периодом квантового перехода ($\tau \cong \hbar/E_n - E_0$). Мы уже исследовали случай малых возмущений такого типа методом вариации постоянных в гл. 18, п. 7. Однако легко обобщить это исследование и на случай больших возмущений. Для этого предположим, что в момент $t = 0$ гамильтониан внезапно изменяется от H_0 до H_1 , а после этого остается постоянным. Вплоть до момента $t = 0$ собственные функции даются выражением $u_n e^{-iE_n^0 t/\hbar}$, где $H_0 u_n = E_n^0 u_n$. После момента $t = 0$ собственные функции оператора Гамильтона обозначим через v_m . Они удовлетворяют уравнению

$$H_1 v_m = E_m v_m, \quad (20.18)$$

и их временная зависимость будет иметь вид $v_m e^{-iE_m t/\hbar}$.

Если система в течение долгого времени была предоставлена самой себе до момента $t = 0$, то она обоснуется в каком-то стационарном состоянии, которое в этом случае является собственным состоянием оператора H_0 . Предположим, что это будет n -е собственное состояние. Тогда волновая функция в момент $t = 0$ будет

$$\psi = u_n(x). \quad (20.19)$$

После момента $t = 0$ $u_n e^{-iE_n^0 t/\hbar}$ не будет больше решением уравнения Шрёдингера, так как гамильтониан внезапно изменяется до значения H_1 . В этот момент волновая функция должна оставаться непрерывной, но, согласно уравнению $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$, скорость ее изменения меняется скачком, когда H_0 переходит в H_1 . Чтобы найти изменение ψ после момента $t = 0$, применим обычную процедуру (см. уравнение (10.73)) разложения ψ в ряд по решениям уравнения Шрёдингера, которые в этом случае имеют вид $v_m e^{-iE_m t/\hbar}$. Поэтому при $t = 0$ мы пишем

$$\psi = u_n(x) = \sum_m C_{mn} v_m(x). \quad (20.20)$$

Коэффициенты C_{mn} могут быть получены путем умножения разложения (20.20) на $v_m^*(x)$ и интегрирования по x . Используя свойства нормировки и ортогональности функций v , получаем

$$C_{mn} = \int v_m^*(x) u_n(x) dx. \quad (20.21)$$

После $t=0$ волновая функция принимает вид

$$\psi_n(y) = \sum_m C_{mn} v_m(y) e^{-iE_m t/\hbar} = \sum \int v_m^*(x) u_n(x) dx v_m(y) e^{-iE_m t/\hbar}. \quad (20.22)$$

Этот вывод, конечно, имеет силу для мгновенных изменений гамильтониана и должен поэтому также быть законным и для достаточно быстрых, но не мгновенных изменений. Существенным упрощением, вытекающим из мгновенного изменения, было то, что волновая функция не изменялась, когда изменялся гамильтониан. Изменение волновой функции за время τ , в течение которого изменяется гамильтониан, определяется экспоненциальным множителем порядка $e^{i(\epsilon_m - \epsilon_n)\tau/\hbar}$, где ϵ_m и ϵ_n — мгновенные величины собственных значений гамильтониана в течение этого времени (ϵ_m обычно находится где-то между начальным энергетическим уровнем E_m^0 и конечным уровнем E_m). Это изменение волновой функции будет малым, если $(\epsilon_m - \epsilon_n)\tau/\hbar \ll 1$, где ϵ_m и ϵ_n — энергетические уровни, которые участвуют в наблюдаемых переходах.

5. Приложения. Испускание электронов из ядра при β -распаде. В процессе β -распада электрон испускается из ядра со скоростью, в большинстве случаев близкой к скорости света [26]. Электрон покидает атом в течение времени порядка r/c , где r — радиус атома. С другой стороны, периоды электронов в атомах порядка $2\pi r/v$, что обычно по крайней мере в 1000 раз больше (v — скорость электронов в атоме). Это означает, что для всех практических целей можно считать заряд ядра внезапно возрастающим с Z до $Z+1$. В момент такого изменения электронная волновая функция $u_n(x)$ соответствует стационарному состоянию для атома с зарядом Z . В новом атоме с зарядом $Z+1$ эта волновая функция больше не соответствует стационарному состоянию, но должна разлагаться по волновым функциям стационарного состояния для нового заряда ядра $Z+1$, как показано в выражении (20.20). Это означает существование определенной вероятности того, что атом будет оставаться в возбужденном состоянии в результате внезапности процесса β -распада. Такое возбуждение может быть обнаружено по последующему испусканию света, которое обычно наблюдается в области рентгеновских лучей.

Фактически существует целый спектр энергий электронов, испускаемых при β -распаде. Небольшая часть электронов испускается с очень малыми скоростями. Электроны, скорости которых намного ниже средних скоростей электронов атома, будут стремиться создать адиабатические возмущения атомных электронов. Однако таких электронов с малой скоростью настолько мало, что эффект от них трудно обнаружить.

Задача 1. Гармонический осциллятор с угловой частотой ω и массой m находится в основном состоянии. Постоянная сила прикладывается в направлении его колебаний на время τ , которое мало по сравнению с периодом колебаний. Вычислить вероятность нахождения осциллятора в первом возбужденном состоянии после снятия силы.

Указание. Если постоянная сила равна a , то к потенциалу добавляется член ax и гамильтониан имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \left(x - \frac{a}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{a^2}{2m\omega^2}.$$

Это выражение представляет собой осциллятор с новой точкой равновесия. Надо пользоваться волновыми функциями осциллятора с новой точкой равновесия, применяя разложение (20.20) к полиному Эрмита первого порядка.

6. Связь между теорией возмущений и теорией внезапных переходов. В гл. 18, п. 7 мы разбирали случай малых возмущений, которые прилагались внезапно при $t = t_0$, и видели, что эти возмущения можно считать причиной переходов на другие уровни невозбужденного гамильтониана H_0 . Однако для более точной трактовки следовало бы пользоваться методом, развитым в том же пункте, и иметь дело со внезапным изменением гамильтониана. Поскольку приложено возмущение, собственные функции H_0 перестают быть стационарными состояниями. Однако эти собственные функции можно разложить в ряд по истинным собственным функциям гамильтониана, тогда

$$u_n = \sum_m C_{mn} v_m(x) e^{-iE_m t/\hbar}.$$

При этом описании волновая функция изменяется, потому что мы имеем линейную комбинацию истинных стационарных состояний, каждое из которых колеблется со своим собственным фазовым коэффициентом. Однако эти изменения полностью эквивалентны тем, которые получались в предположении, что возмущение является причиной перехода в другое собственное состояние невозмущенного гамильтониана.

Задача 2. Доказать, что для малых возмущений метод вариации постоянных приводит к тем же результатам, что и приближение «внезапного изменения потенциала».

ЧАСТЬ V

ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ

ГЛАВА 21

ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ

1. Введение. Если пучок каких-либо частиц падает на вещество, то частицы отклоняются от своего первоначального пути в результате столкновений со встречными частицами вещества. Важность изучения процессов рассеяния обусловлена двумя причинами. Во-первых, характер множества интересных явлений, подобных торможению электронов в газовом разряде, столкновению газовых молекул и торможению частиц радиоактивных и космических лучей, определяется, по крайней мере частично, вероятностью рассеяния. Во-вторых, что возможно даже важнее, детальное изучение актов рассеяния дает возможность многое узнать о природе как рассеиваемых, так и рассеивающих частиц. Значительная часть наших знаний по атомной и ядерной физике была получена именно в результате таких опытов по рассеянию.

2. Классическая теория рассеяния. Первоначально атом рассматривали как идеально упругое тело более или менее сферической формы. Так как атомы газа движутся беспорядочно, то они должны случайно сталкиваться друг с другом и отклоняться при этом от направления своего движения. Вероятность столкновения зависит от трех факторов: плотности молекул, их размеров и их средней скорости.

Если молекулы представляются шариком радиуса a , то столкновение будет иметь место, когда центры двух молекул подойдут друг к другу на расстояние ближе величины $d = 2a$. Для вычисления вероятности того, что за короткий промежуток времени dt данная частица столкнется с другой, рассмотрим цилиндр с площадью основания πd^2 и высотой, равной расстоянию $dx = v dt$, проходимому частицей за это время. Тогда вероятность столкновения как раз равна вероятности того, что центр другой частицы лежит внутри этого цилиндра. Обозначая плотность частиц через ρ , находим для этой вероятности

$$dP = \rho \pi d^2 v dt. \quad (21.1a)$$

Строго говоря, выражение для вероятности правильно только для промежутков времен настолько коротких, что dP мало. Если взять большой отрезок времени, то цилиндр, о котором речь шла выше, может содержать так много молекул, что некоторые из них окажутся на пути других, т. е. могут оказаться в «тени» других. Такой случай изображен на рис. 93. Проследим за движением, например,



Рис. 93.

молекулы A . Так как она может столкнуться с молекулой B , то вероятность ее столкновения с молекулой C после этого уменьшается, поскольку она может отклониться или даже остановиться, прежде чем столкнется с молекулой C . Если пробег молекулы настолько длинный, что вероятность столкновения велика, то нужно принять во внимание возможность осуществления больше чем одного столкновения, т. е. пользоваться теорией многократного рассеяния ([11], стр. 221). Однако мы не будем разбирать здесь случая многократного рассеяния и ограничимся столь малой толщиной рассеивающих мишеней, что многократным рассеянием можно пренебречь. Это ограничение соответствует случаю «тонкой» мишени, противоположному случаю «толстой» мишени.

3. Определение поперечного сечения. Вероятность того, что частица будет рассеиваться при прохождении данной толщины вещества dx , может быть охарактеризована величиной, носящей название «поперечного сечения рассеяния». Заметим в связи с этим, что каждая молекула представляет для налетающей на нее частицы мишень, площадь которой равна $\sigma = \pi d^2$. Эта площадь мишени и есть как раз поперечное сечение той области, в которой может произойти столкновение, если смотреть вдоль направления движения пучка. Отсюда и происходит название «поперечное сечение рассеяния».

Если, как это обычно бывает, мы имеем дело с образцом, содержащим много молекул, то полная площадь мишени точно равна сумме поперечных сечений отдельных молекул. В действительности это утверждение справедливо, только пока образец настолько тонок, что маловероятно заслонение какой-нибудь одной молекулы другой. Если это условие не выполняется, то полная площадь мишени будет меньше, чем сумма поперечных сечений отдельных молекул. Однако если мишень достаточно тонка, то пластинка вещества площади A и толщины dx , содержащая $\rho A dx$ молекул, будет представлять собой

эффективную площадь мишени, равную $\rho A \sigma dx$. Относительная величина общей площади A , которая «закрывается» молекулами, будет тогда $\rho A \sigma dx / A = \rho \sigma dx$. Вероятность того, что падающая частица испытает столкновение, будет как раз равна этой величине. Таким образом, получаем

$$dP = \rho \sigma dx. \quad (21.16)$$

Заменяя σ через πd^2 , мы видим, что это выражение совпадает с уравнением (21.1a). Уравнение (21.16) является основным соотношением, связывающим вероятность столкновения с поперечным сечением рассеяния.

4. Распределение длин свободного пробега. Длинной свободного пробега называется расстояние, проходимое частицей между двумя последовательными столкновениями. Она будет, очевидно, изменяться более или менее случайно, в зависимости от того, где рассеивающая молекула попадет на пути падающей частицы. Именно вследствие случайного распределения рассеивающих молекул может получиться, что частица будет иметь очень большую длину свободного пробега. Однако в среднем существует такое статистическое распределение длин свободных пробегов, что большинство из них будет близко к средней величине.

Вычисление средней длины свободного пробега начнем с вероятности $Q(x)$ того, что частица не испытает столкновения на расстоянии x . Это вероятность того, что длина свободного пробега равна или больше x . Заметим, что на расстоянии dx вероятность Q убывает на величину, равную вероятности столкновения на этом расстоянии. Однако последняя вероятность равна вероятности достижения частицей точки x без столкновений, умноженной на вероятность того, что если частица находится в этой точке, то столкновение произойдет. Согласно уравнению (21.16), вероятность столкновения в точке x равна $\rho \sigma dx$. Следовательно, $dQ = -Q \rho \sigma dx$, или $Q = e^{-\rho \sigma x}$ (заметим, что $Q = 1$ при $x = 0$). Вероятность того, что длина свободного пробега лежит между x и $x + dx$, получается дифференцированием этого выражения:

$$R(x) = \left| \frac{dQ}{dx} \right| = \rho \sigma e^{-\rho \sigma x}.$$

Средняя длина свободного пробега равна

$$l = \int_0^{\infty} x R(x) dx = \int_0^{\infty} \rho \sigma e^{-\rho \sigma x} x dx = \frac{1}{\rho \sigma}. \quad (21.2)$$

5. Зависимость поперечного сечения от угла рассеяния. До сих пор мы не рассматривали распределения углов рассеяния, которые могут получиться в результате столкновения. Изучение этой

задачи начнем со специального случая, в котором рассеивающая молекула очень легка по сравнению с рассеиваемой молекулой. Тогда можно считать, что в процессе столкновения последняя практически остается в покое. Более общий случай будет рассмотрен в п. 12. Примем также, что все молекулы являются твердыми упругими шариками радиуса a . Угол рассеяния частицы (θ) определяется как угол между направлениями движения до и после столкновения. Этот

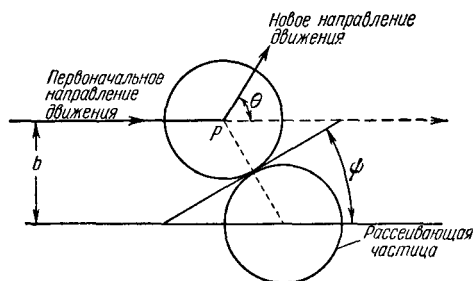


Рис. 94.

угол будет зависеть от того, насколько прямо столкнулись две частицы. Например, в двух предельных случаях мы можем иметь либо «лобовой» удар с отклонением, близким к π , либо «скользящий» удар со сравнительно малым отклонением. Для решения этой задачи рассмотрим рис. 94. Угол рассеяния θ , очевидно, зависит от ближайшего расстоя-

ния b между первоначальным направлением движения и центром O рассеивающей частицы. Это расстояние называется «параметром столкновения, или удара», или «прицельным расстоянием». Если шарики идеально упругие, то угол отклонения будет точно вдвое больше угла ϕ между первоначальным направлением движения и касательной к двум сферам в точке их соприкосновения:

$$\theta = 2\phi.$$

Далее, элементарное геометрическое рассмотрение показывает, что

$$\cos \phi = \frac{b}{2a}, \quad \text{или} \quad \theta = 2 \arccos \left(\frac{b}{2a} \right).$$

Все частицы, имеющие параметр удара b , меньший чем $2a \cos \phi$, отклонятся на угол, больший чем $\theta = 2\phi$. Тогда, если определить, что поперечное сечение $S(\theta)$ равно эффективной площади, создающей отклонения больше чем на угол θ , то получим (для модели упругих шариков)

$$S(\theta) = \pi b^2 = 4\pi a^2 \cos^2 \phi = 4\pi a^2 \cos^2 \frac{\theta}{2}. \quad (21.3)$$

$S(\theta)$ называется полным (интегральным) поперечным сечением рассеяния на угол θ и больше. Ясно, что только часть рассеивающей сферы эффективна при создании больших отклонений, следовательно, $S(\theta)$ уменьшается с ростом θ .

6. Дифференциальные поперечные сечения. Другой существенной характеристикой процесса рассеяния является дифференциальное поперечное сечение $q(\theta)$, которое определяется тем, что произведение $q(\theta)d\theta$ дает поперечное сечение, создающее отклонения, лежащие в интервале между θ и $\theta + d\theta$. Оно получается дифференцированием $S(\theta)$:

$$q(\theta) = \left| \frac{dS}{d\theta} \right|. \quad (21.4)$$

Для твердых упругих шариков

$$q(\theta) = 4\pi a^2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} = 2\pi a^2 \sin \theta. \quad (21.5)$$

Еще одной важной характеристикой рассеяния является дифференциальное поперечное сечение на единицу телесного угла. Чтобы проиллюстрировать входящие сюда углы, рассмотрим рис. 95:

θ — угол отклонения, а φ — азимутальный угол, образуемый движением отклоненной частицы относительно некоторого стандартного направления. Тогда поперечное сечение на единичный телесный угол $\sigma(\theta, \varphi)$ определяется так, что эффективная площадь, приводящая к отклонениям внутри элемента телесного угла $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$, равна *)

$\sigma(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi$. В случае твердого шарика величина $\sigma(\theta, \varphi)$ не зависит от азимута φ . Если бы частица была не сферической формы, то ясно, что вероятность отклонения для различных азимутов $d\varphi$ была бы различной. В общем случае связь между $\sigma(\theta, \varphi)$ и $q(\theta)$ имеет вид

$$q(\theta) = \sin \theta \int_0^{2\pi} \sigma(\theta, \varphi) d\varphi. \quad (21.6a)$$

Для случая, когда σ не зависит от φ , находим

$$q(\theta) = 2\pi \sin \theta \sigma(\theta). \quad (21.6b)$$

Из вышеприведенного определения ясно, что для твердого шарика

$$\sigma = a^2. \quad (21.6b)$$

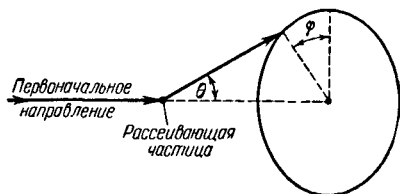


Рис. 95.

*) Входящую здесь в формулы величину σ не следует путать с величиной σ , введенной в п. 3, где она равна полному поперечному сечению. Ниже, если это не будет специально оговорено, σ будет относиться к поперечному сечению на единицу телесного угла.

Это означает, что для твердого шарика существует однородная вероятность рассеяния, приходящаяся на элемент телесного угла.

Типичное экспериментальное устройство в задачах рассеяния показано на рис. 96. Рассеянные частицы фиксируются детектором.

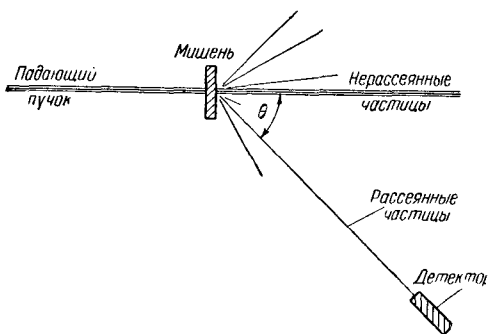


Рис. 96.

Число рассеянных частиц, попадающих в детектор за единицу времени, равно $j\rho\sigma d\Omega$, где j — поток падающих частиц на единицу площади, а $d\Omega$ — телесный угол, стягиваемый детектором от мишени. По измеренному числу частиц, попадающих в детектор, можно вычислить σ , если ρ и j известны.

Для газовых мишеней экспериментальная задача обычно намного труднее,

но эти трудности часто удается обойти различными специальными приемами.

7. Более общая теория рассеяния. До сих пор мы рассматривали процесс рассеяния в предположении, что частицы ведут себя, как твердые упругие шарики.

Однако это предположение справедливо далеко не всегда. Например, межатомные силы могут быть описаны потенциальной кривой, изображенной на рис. 97. Атомы притягиваются на больших расстояниях и отталкиваются на малых. Так как сила отталкивания возрастает довольно резко при сближении атомов, то существует некоторый радиус r_0 , приближенно

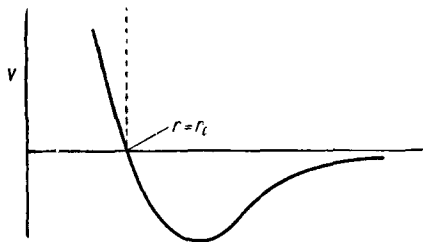


Рис. 97.

его можно определить как эффективный атомный радиус, на расстоянии меньше которого очень трудно сблизить атомы. Твердый шарик имел бы потенциал, равный нулю повсюду, где $r > r_0$, и бесконечности для $r < r_0$. Некоторые атомные системы приближаются по своим свойствам к твердым шарикам больше, другие меньше. Например, в атомах благородных газов силы притяжения очень малы, а силы отталкивания возрастают весьма резко. В результате они ведут себя почти как «твердые шарики». С другой стороны, например, атомы натрия гораздо «мягче» в том смысле, что сила отталкивания для них не нарастает так резко. Потенциал между заря-

женными частицами ($V = e^2/r$) приводит к еще более «мягкой» силе, настолько «мягкой», что совсем неприемлемо приближение твердых шариков.

Попробуем теперь обобщить наше рассмотрение и вычислить поперечные сечения для произвольного сферически симметричного закона взаимодействия между частицами. Заметим прежде всего, что орбита атома в случае сферически симметричной силы будет всегда лежать в одной плоскости. Такая орбита изображена на рис. 98. Определим раньше всего параметр столкновения b , который, как и в случае твердых шариков, равен расстоянию между первоначальным направлением движения и центром рассеивающей силы. Частица будет двигаться по изображенной на рисунке орбите. (Этот случай относится к силам отталкивания, для сил притяжения орбита искривляется иным образом.) Полное отклонение обозначено через угол θ ; расстояние ближайшего сближения равно a . Мгновенное положение частицы задается полярным углом φ и радиусом r .

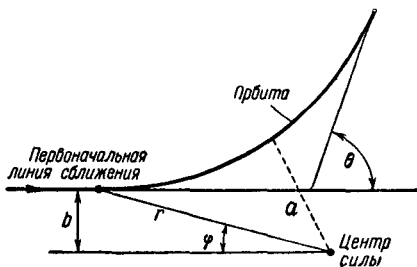


Рис. 98.

В общем случае оказывается, что если разрешимы уравнения движения, то отклонение θ будет всегда некоторой функцией параметра столкновения b :

$$\theta = \theta(b)$$

или, наоборот,

$$b = b(\theta).$$

Поперечное сечение рассеяния для интервала углов от θ до $\theta + d\theta$ будет равно площади кольца ($2\pi b db$), через которое проходят частицы, если они рассеиваются в указанной области углов. Таким образом,

$$q(\theta) d\theta = 2\pi b \frac{db}{d\theta} d\theta. \quad (21.7a)$$

Полное поперечное сечение рассеяния на угол θ и больше получается интегрированием от $b=0$ до $b=b(\theta)$ уравнения (21.7a)

$$S(\theta) = \int_0^{b(\theta)} 2\pi b db = \pi b^2(\theta). \quad (21.7b)$$

Полученное выражение есть площадь круга радиуса $b(\theta)$.

Полное поперечное сечение рассеяния по всем возможным значениям углов (от $\theta = 0$ и больше) находим, положим $\theta = 0$ в выражении (21.76):

$$S(0) = \int_0^{\pi} q(\theta) d\theta = \pi b^2(0). \quad (21.7в)$$

Для вычисления различных поперечных сечений необходимо, по крайней мере в принципе, определить орбиту частицы и использовать уравнения орбиты для вычисления угла θ как функции параметра b .

8. Приближение малых отклонений. Классическая теория возмущений. Разберем здесь приближенный метод определения функции $\theta(b)$, пригодный для случая малых углов θ . Малые отклонения, как правило, являются результатом действия слабых сил, а силы обычно будут самыми слабыми, когда частицы очень далеки от центра сил, т. е. когда параметр b велик.

Определим прежде всего выражение для угла отклонения θ . Выберем ось x в направлении первоначального движения, а ось y нормально к нему. Пусть p будет начальный импульс, который, конечно, всегда направлен по оси x . Под действием силы частица приобретает y -компоненту импульса, которую мы обозначим через p_y . Тогда угол отклонения определится выражением

$$\sin \theta = \frac{p_y}{p}.$$

Следующим этапом является вычисление p_y . Так как величина p_y первоначально равнялась нулю, то из ньютоновских законов движения имеем

$$p_y = \int_{-\infty}^{\infty} F_y dt.$$

Если сила сферически симметрична, то $F_y = (y/r)F$, где F — полная сила. Тогда

$$p_y = \int_{-\infty}^{\infty} y \frac{F(r)}{r} dt.$$

Чтобы вычислить точно этот интеграл, мы должны знать r и y как функции t . Это равносильно решению уравнений движения. Однако наш метод приближения основан на том, что если отклоняющая сила мала, то частица с примерно постоянной скоростью движется по траектории, которая почти не отличается от первоначальной прямой линии. Так как p_y уже малая величина, то отличия, которые полу-

чаются при вычислении r в предположении отсутствия сил, от истинного значения r будут второго порядка малости. Поэтому хорошим приближением будет вычисление r вдоль «невозмущенной орбиты», т. е. вдоль прямой линии, по которой двигалась бы частица в отсутствие силы. Тогда можно написать

$$y \cong b, \quad x \cong vt, \quad r \cong \sqrt{b^2 + v^2 t^2}$$

и

$$\theta \cong \sin \theta = \frac{p_y}{p} \cong \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b F(\sqrt{b^2 + v^2 t^2}) dt}{p \sqrt{b^2 + v^2 t^2}}.$$

Удобно ввести новую переменную $t = bu/v$. В результате, используя соотношения $p = mv$ и $E = mv^2/2$, получаем

$$\theta \cong \frac{b}{2E} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(b\sqrt{1+u^2}) du}{\sqrt{1+u^2}}. \quad (21.8)$$

Это и является искомым результатом. Применим его к некоторым конкретным случаям.

а) *Кулоновская сила*. В этом случае $F = Z_1 Z_2 e^2 / r^2$, где Z_1 — заряд рассеивающих частиц в единицах заряда электрона, а Z_2 — заряд рассеянной частицы. Такое выражение для силы приводит к соотношению

$$\theta \cong \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2bE} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dU}{(1+u^2)^{3/2}} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{Eb}. \quad (21.9a)$$

Из формулы видно, что угол отклонения обратно пропорционален параметру удара b . Это важный результат. Дифференциальное поперечное сечение рассеяния равно

$$q(\theta) = 2\pi b \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{2\pi (Z_1 Z_2 e^2)^2}{E^2 \theta^3}. \quad (21.9b)$$

Отметим несколько существенных моментов.

1) Дифференциальное поперечное сечение рассеяния для заданного угла θ является быстро убывающей функцией энергии. Физически это объясняется тем, что требуется большая сила для отклонения быстрой частицы, а такая добавочная сила может быть получена только при меньших параметрах удара. Поэтому и происходит быстрое уменьшение θ с ростом E .

2) Если $\theta \rightarrow 0$, то дифференциальное поперечное сечение рассеяния стремится к бесконечности. В действительности интегральное поперечное сечение рассеяния $S(\theta)$ также стремится к бесконечности.

Это объясняется тем, что кулоновская сила принадлежит к типу дальнодействующих сил. Малые отклонения получаются при больших параметрах столкновения, которым соответствуют большие дифференциальные поперечные сечения.

3) В действительности предположение о том, что кулоновская сила остается неизменной на произвольно больших расстояниях, является абстракцией. Например, кулоновские силы, действующие со стороны атомных ядер, экранируются атомными электронами уже на расстояниях порядка нескольких атомных радиусов. Результирующая форма потенциала изображена на рис. 99. Аналогично в ионизированном газе или в электролите ионы данного знака всегда окружены облаком заряда, содержащего ионы противоположного знака, которые экранируют кулоновский потенциал

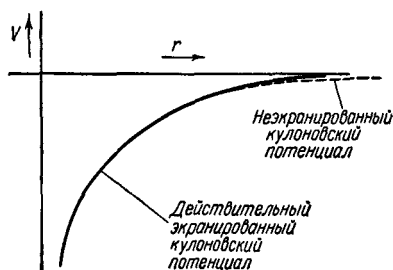


Рис. 99.

на достаточно больших расстояниях (см. [40], стр. 314). В общем случае в любой реальной задаче имеет место такое экранирование.

Хорошим приближением для экранирования кулоновского потенциала является выражение

$$V = \frac{Ze^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right). \quad (21.10)$$

Экспоненциальный множитель обуславливает то, что сила становится ничтожно малой при $r/r_0 \gg 1$.

4) При экранировании кулоновского потенциала угол рассеяния θ стремится к нулю с ростом b значительно быстрее, чем $1/b$, если параметр b значительно превышает радиус экранирования. В действительности уже совсем близко к радиусу экранирования весь эффект рассеяния становится ничтожно малым. Можно определить минимальный угол, меньше которого поперечное сечение рассеяния перестает возрастать, если в уравнении (21.9а) положить $b = r_0$, т. е.

$$\theta_{\min} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{Er_0}. \quad (21.11)$$

На рис. 100 и рис. 101 показаны поперечные сечения рассеяния как функции угла соответственно для неэкранированной и экранированной кулоновской силы.

5) Следует напомнить, что теория возмущений становится неприменимой для больших углов $\theta (\cong 1/2)$. В п. 10 будет получен точный результат для всех значений θ .

б) Закон силы в виде $1/r^3$. Для этого случая $F = K/r^3$ и

$$\theta = \frac{K}{2b^2E} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{(1+u^2)^2} = \frac{\pi K}{4b^2E}, \quad (21.12a)$$

$$b^2 = \frac{\pi K}{4E\theta}. \quad (21.126)$$

Дифференциальное поперечное сечение рассеяния равно

$$q(\theta) = \pi \left| \frac{d}{d\theta} [b^2(\theta)] \right| = \frac{\pi^2 K}{4E\theta}. \quad (21.12в)$$

Задача 1. Получить дифференциальное поперечное сечение рассеяния для $F = r^{-n}$.

Мы видим, что зависимость поперечного сечения рассеяния от энергии и угла определяется законом взаимодействия частиц.

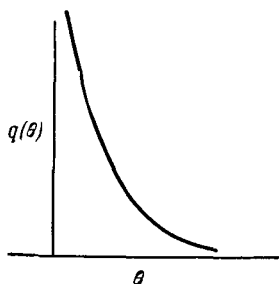


Рис. 100.

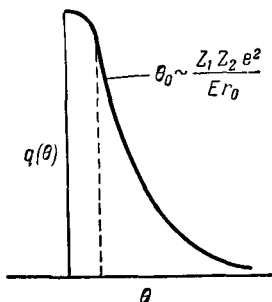


Рис. 101.

Следовательно, экспериментальное изучение этих величин дает информацию о законе взаимодействия *). Мы вернемся к этому вопросу в п. 11.

9. Поперечное сечение передачи энергии и импульса. В некоторых случаях (см. уравнения (21.96) и (21.12в)) получаются поперечные сечения, которые не только равны бесконечности при $\theta = 0$, но дают также бесконечность при интегрировании по углу θ . Как показано в п. 8, такое бесконечное поперечное рассеяние просто указывает на то, что если хотят учитывать достаточно малые отклонения, то их можно получить при очень больших параметрах удара. Однако такие малые отклонения обычно приводят лишь к соответственно малым физическим эффектам. Например, для заряженных

*) Формулы, полученные в этом пункте, применимы только в классическом пределе. Обобщение этих расчетов на квантовую область дается в пп. 23 и 47.

частиц тормозная способность вещества определяется средним значением передаваемой энергии от направления первоначального движения частиц к перпендикулярному направлению. Потеря энергии частиц в первоначальном направлении движения вследствие столкновений равна

$$\Delta E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{p^2 \sin^2 \theta}{2m} \cong \frac{p^2 \theta^2}{2m}.$$

Следовательно, среднее значение передаваемой энергии равно

$$\overline{\Delta E} = \int_0^\pi q(\theta) \Delta E(\theta) d\theta \cong \frac{p^2}{2m} \int_0^\pi q(\theta) \theta^2 d\theta.$$

Как правило, среднее значение передаваемой энергии остается конечным, даже если само поперечное сечение бесконечно велико. Например, если сила взаимодействия $F = K/r^3$, то получаем (см. уравнение (21.12в))

$$\overline{\Delta E} \cong \frac{p^2}{2m} \frac{\pi^2 K}{4E} \int_0^\pi \frac{\theta^2 d\theta}{\theta^2} = \frac{\pi^3 p^2 K}{8mE}. \quad (21.13a)$$

Для поперечного сечения при кулоновском взаимодействии имеем

$$\overline{\Delta E} \cong \frac{p^2}{2m} 2\pi \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{E^2} \int_{\theta_{\min}}^\pi \frac{\theta^2 d\theta}{\theta^3} = \frac{\pi p^2}{m} \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{E^2} \lg \left(\frac{\pi}{\theta_{\min}} \right), \quad (21.13б)$$

где $\theta_{\min}$ — минимальный угол кулоновского рассеяния, определяемый по радиусу экранирования.

Хотя этот результат превращается в бесконечность, когда $\theta_{\min} \rightarrow 0$, но логарифм изменяется настолько медленно в зависимости от $\theta_{\min}$, что практически результат не очень чувствителен к фактическому значению $\theta_{\min}$ в очень широких пределах *). Таким образом, грубая оценка $\theta_{\min}$ обычно дает хорошее приближение для $\overline{\Delta E}$.

10. Точное решение задачи рассеяния. Распространить теорию рассеяния на большие углы можно, если получить точное решение для движения рассеиваемой частицы. Воспользуемся для этого следующими двумя уравнениями:

$$mr^2 \frac{d\varphi}{dt} = m v b \quad (\text{закон сохранения момента количества движения}), \quad (21.14a)$$

$$\frac{m}{2} \left[\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + r^2 \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \right] + V(r) = \frac{mv^2}{2} \quad (\text{закон сохранения энергии}). \quad (21.14б)$$

*) Ограничения для минимального угла рассеяния, данные выше, применимы только при условии справедливости классической теории. Аналогичные ограничения получаются и в квантовой области, но они не совпадают точно с теми, которые справедливы в классическом пределе (см. пп. 21, 32, 35 и 38).

(Заметим также, что для потенциала принято условие $V(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$.) Подстановка уравнения (21.14а) в (21.14б) дает

$$\frac{dr}{dt} = \pm \sqrt{v^2 - \frac{b^2 v^2}{r^2} - \frac{2}{m} V(r)}.$$

Разделим уравнение (21.14а) почленно на это равенство, тогда

$$\frac{d\varphi}{dr} = \pm \frac{vb}{r^2 \sqrt{v^2 - \frac{b^2 v^2}{r^2} - \frac{2}{m} V(r)}}.$$

Теперь можно получить решение для отклонения θ , интегрируя последнее выражение от $r = \infty$ до $r = a$ (a — минимальное расстояние сближения) и опять до ∞ . Из рис. 98 видно, что если начать интегрирование с $\varphi = 0$, то получим

$$\Delta\varphi = \pi - \theta, \quad \text{или} \quad \theta = \pi - \Delta\varphi.$$

Но так как подынтегральная величина пробегает тот же самый ряд значений на первом и втором интервалах интегрирования, то можно просто удвоить результат интегрирования по r от a до ∞ :

$$\Delta\varphi = 2vb \int_a^\infty \frac{dr}{r^2 \sqrt{v^2 - \frac{2V(r)}{m} - \frac{b^2 v^2}{r^2}}}. \quad (21.15)$$

Подставляя в это уравнение конкретное значение потенциала $V(r)$, получаем возможность в принципе вычислить функцию $\theta(b)$, затем $b(\theta)$ и, наконец, $q(\theta)$.

Пример. Кулоновское рассеяние. Резерфордская формула поперечного сечения.

Примем для потенциала $V = Z_1 Z_2 e^2 / r$, тогда

$$\Delta\varphi = 2vb \int_a^\infty \frac{dr}{r^2 \sqrt{v^2 - \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{mr} - \frac{b^2 v^2}{r^2}}}.$$

Здесь удобно воспользоваться подстановкой $r = 1/u$, $du = -dr/r^2$, которая дает

$$\Delta\varphi = 2vb \int_0^{1/a} \frac{du}{\sqrt{v^2 - \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{m} u - b^2 v^2 u^2}} = 2 \int_0^{1/a} \frac{du}{\left(\frac{1}{b^2} - \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{mb^2 v^2} u - u^2\right)^{1/2}}.$$

Минимальное расстояние сближения можно определить из условия $dr/dt = 0$. Вместе с тем это расстояние таково, что для него знаменатель подынте-

гральной величины точно равен нулю. После вычисления написанного выше интеграла получаем

$$\Delta\varphi = \pi - \theta = 2 \arccos \frac{Z_1 Z_2 e^2}{mbv^2}, \quad \text{или} \quad \frac{Z_1 Z_2 e^2}{mbv^2} = \sin \frac{\theta}{2},$$

и

$$b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{mv^2 \sin \frac{\theta}{2}} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E \sin \frac{\theta}{2}}. \quad (21.16a)$$

Дифференциальное поперечное сечение рассеяния равно

$$q(\theta) = 2\pi b \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{\pi (Z_1 Z_2 e^2)^2}{4E^2} \frac{\cos \frac{\theta}{2}}{\sin^3 \frac{\theta}{2}}.$$

Легко проверить, что для малых θ получаем, в согласии с приближенным уравнением (21.96),

$$q(\theta) = 2\pi \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{E^2 \theta^3}. \quad (21.166)$$

Поперечное сечение рассеяния, рассчитанное на единицу телесного угла, равно

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{2\pi} \frac{q(\theta)}{\sin \theta} = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{16E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (21.16в)$$

Это и есть хорошо известная формула рассеяния, полученная впервые Резерфордом.

11. Использование поперечных сечений рассеяния для исследования вида взаимодействия между частицами. До сих пор мы предполагали, что известен вид взаимодействия между частицами, и пытались определять поперечное сечение рассеяния. Однако часто, наоборот, используют найденные значения поперечного рассеяния для определения неизвестного типа взаимодействия между частицами. Для этой цели можно указать несколько способов. Наиболее обычный способ заключается в предположении, что потенциал имеет какой-то простой вид, например $Ke^{-r/r_0}/r^n$, и выясняют, как нужно подобрать величины параметров K , r_0 и n , чтобы получить подходящие результаты. При этом необходимо иметь ясные представления, какая область радиусов действия зондируется рассеивающимися частицами данного интервала энергии и данных углов рассеяния. Например, в случае кулоновского взаимодействия для малых отклонений уравнение (21.16a) дает

$$b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E \sin \frac{\theta}{2}}.$$

В общем случае частицы с данным параметром удара испытывают отклонения, которые больше всего зависят от величины силы на расстояниях порядка параметра удара. Это обусловлено тем, что сила обычно довольно резко убывает с расстоянием, поэтому наибольшую силу отклонения следует ожидать, когда частица находится в области, линейные размеры которой порядка параметра удара. Кроме того, так как величина dr/dt в этой области близка к нулю, то частица и находится здесь дольше. Следовательно, согласно полученной выше формуле, для исследования природы взаимодействия на малых расстояниях необходимо, чтобы были большими или E , или θ , или обе эти величины. Угол θ ограничен, он не может превышать значения, равного π . Поэтому существует некоторое минимальное значение энергии частицы, начиная с которого можно изучать силу взаимодействия на заданном расстоянии:

$$E = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2b}. \quad (21.17)$$

Задача 2. Определить энергию рассеивающихся на ядрах бериллия α -частиц, которые имеют $\theta = 10^\circ$ при параметре удара 10^{-12} см.

Определение полного поперечного сечения рассеяния $S(\theta)$ для заданного значения θ даже более ценно, чем определение лишь одного дифференциального поперечного сечения рассеяния. Это обусловлено тем, что измерения $S(\theta)$ эквивалентны измерению параметра удара $b = [S(\theta)/\pi]^{1/2}$, поэтому становится известным параметр столкновения, требуемый для данного отклонения θ . Так как потеря импульса равна $\Delta p = p \sin \theta$, то мы получаем сведения о величине силы в области с линейными размерами порядка $b = (S/\pi)^{1/2}$.

Тщательное исследование рассеяния α -частиц, излучаемых различными ядрами естественных радиоактивных элементов, произвел Резерфорд. Он показал при этом, что наблюдаемое рассеяние достаточно точно вплоть до очень малых расстояний подтверждает предположение о кулоновском типе сил взаимодействия. На основе этих результатов и была создана модель атома, согласно которой в центре атома находится локализованное в небольшом объеме пространства заряженное ядро, окруженное планетарными электронами. Эта модель прекрасно согласуется с опытами по рассеянию быстрых частиц на атомах. Однако по мере того, как такие опыты стали проводиться при все более и более высоких энергиях, были обнаружены отклонения от законов рассеяния, установленных в предположении кулоновского взаимодействия между частицами. Эти отклонения были получены при энергиях в несколько сотен килоэлектрон-вольт, откуда можно было заключить, что на расстояниях порядка 10^{-12} см или меньше (см. задачу 2) становятся существенными новые силы, не кулоновского происхождения. Путем тщательного исследования

зависимости поперечного сечения рассеяния от энергии и угла были выяснены многие свойства так называемых «ядерных сил». Мы вернемся к этому вопросу позже, в связи с вопросами квантовой теории рассеяния, потому что для этих сил существенны квантовые эффекты. Пока же ограничимся только качественным замечанием, что зависимость поперечного сечения рассеяния от угла и энергии определяет меру «мягкости» закона взаимодействия между частицами. Например, в случае твердой сферы поперечное сечение рассеяния всегда равно $4\pi a^2$, независимо от угла и от величины энергии. Но если сила «мягкая», как, например, кулоновская, то частица высокой энергии испытывает заметное отклонение только при очень близком подходе к ядру, таким образом, поперечное сечение рассеяния при заданном угле отклонения быстро убывает с ростом энергии. Поэтому, вследствие дальнего действующего характера неэкранированной кулоновской силы, имеется огромная площадь мишени, на которой можно получить очень малые отклонения; отсюда мы и приходим к бесконечным значениям поперечного сечения рассеяния при $\theta \rightarrow 0$.

12. Переход от системы координат центра инерции к лабораторной системе координат. До сих пор все рассуждения велись в предположении, что рассеиватель остается в покое при столкновении, так как он намного тяжелее рассеиваемой частицы. Чтобы перейти к более общему случаю, начнем с рассмотрения хорошо известного результата классической механики (см. [11], стр. 120), согласно которому в координатной системе, движущейся с центром инерции двух частиц, уравнения движения для относительных координат $\xi = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ оказываются точно такими же, как и уравнения движения для одной частицы с тем же потенциалом $V(\xi)$, но с приведенной массой

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

и приведенной энергией $E = \frac{\mu}{2} \left(\frac{d\xi}{dt} \right)^2$. Такой же общий результат справедлив и в квантовой теории. Поэтому уравнения для рассеяния могут быть решены точно таким же образом, как делалось раньше, при условии, что мы тщательно следим за правильным выбором постоянных.

В системе координат, связанной с центром инерции, обе частицы начинают приближаться к центру инерции с противоположных направлений и с такими скоростями, что полный момент количества движения равен нулю:

$$m_1 v_1 = m_2 v_2.$$

Частицы должны рассеиваться в противоположных направлениях, чтобы полный момент и после столкновения оставался равным нулю. Поэтому обе орбиты будут иметь вид, изображенный на рис. 102.

Теперь наша задача заключается в преобразовании поперечного сечения рассеяния $q(\theta')$, вычисленного в системе центра инерции, обратно в лабораторную систему, в которой поперечное сечение рассеяния всегда наблюдается.

Для этого необходимо прежде всего преобразовать углы θ' , измеренные в системе центра инерции, обратно в лабораторную систему. Столкновения обычно происходят между падающими частицами и рассеивающими, которые покоятся в лабораторной системе координат. Пусть масса последних будет m_1 , а масса падающих частиц m_2 . Пусть падающие частицы первоначально (т. е. до столкновения) двигались со скоростью v , например, по оси x . Тогда скорость центра инерции системы будет тоже направлена по оси x и равна $w = \frac{m_2 v}{m_1 + m_2}$.

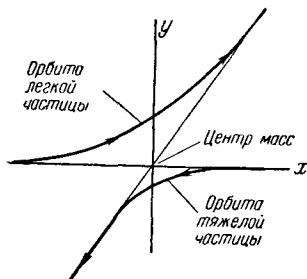


Рис. 102.

В системе, связанной с центром инерции, относительная скорость $|d\xi/dt|$ тоже равна v . Но теперь скорость каждой частицы обратно пропорциональна ее массе. Следовательно, перед столкновением для первой частицы

$$(U_{10})_x = -\frac{m_2}{m_1 + m_2} v, \quad (U_{10})_y = 0;$$

для второй частицы

$$(U_{20})_x = \frac{m_1 v}{m_1 + m_2}, \quad (U_{20})_y = 0.$$

После столкновения, которое приводит к рассеянию на угол θ' в системе центра инерции, получаем

$$(U_1)_x = -\left(\frac{m_2}{m_1 + m_2}\right) v \cos \theta' \quad \text{и} \quad (U_1)_y = -\left(\frac{m_2}{m_1 + m_2}\right) v \sin \theta',$$

$$(U_2)_x = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\right) v \cos \theta' \quad \text{и} \quad (U_2)_y = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\right) v \sin \theta'.$$

Заметим, что в результате столкновения относительная скорость v остается неизменной.

Чтобы получить скорость в лабораторной системе после рассеяния, нужно прибавить скорость движения центра инерции к записанным выше x -слагающим скоростей:

$$(U_1)_x = \frac{(m_2 - m_2 \cos \theta')}{m_1 + m_2} v \quad \text{и} \quad (U_1)_y = -\left(\frac{m_2}{m_1 + m_2}\right) v \sin \theta',$$

$$(U_2)_x = \frac{(m_2 + m_1 \cos \theta')}{m_1 + m_2} v \quad \text{и} \quad (U_2)_y = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\right) v \sin \theta',$$

Тогда углы отклонений частиц в лабораторной системе выражаются формулами

$$\text{и} \quad \left. \begin{aligned} \operatorname{tg} \theta_1 &= \frac{(U_1)_y}{(U_1)_x} = -\frac{\sin \theta'}{1 - \cos \theta'} = -\operatorname{ctg} \frac{\theta'}{2} \\ \operatorname{tg} \theta_2 &= \frac{(U_2)_y}{(U_2)_x} = \frac{m_1 \sin \theta'}{m_2 + m_1 \cos \theta'}. \end{aligned} \right\} \quad (21.18)$$

Эти уравнения полностью определяют углы, под которыми ударяется каждая из двух частиц, как функции угла рассеяния в системе центра инерции. Чтобы получить поперечник рассеяния в лабораторной системе, надо воспользоваться тем, что $q(\theta') d\theta'$ пропорционально числу частиц, которые рассеяны под углами, лежащими в интервале между θ' и $\theta' + d\theta'$, а $q(\theta) d\theta$ — число частиц, которые рассеяны под углами, лежащими в интервале между θ и $\theta + d\theta$. Если мы выбираем угол θ таким образом, чтобы он был связан с углом θ' этим условием, то число частиц, рассеянных в соответствующих интервалах углов $d\theta$ и $d\theta'$, по определению должно быть одинаковым:

$$q(\theta) d\theta = q(\theta') d\theta'$$

или

$$q(\theta) = q(\theta') \frac{d\theta'}{d\theta}.$$

Для рассеянных частиц угол θ дается уравнением (21.18) для θ_2 . Дифференцируя соотношение (21.18), получаем

$$\sec^2 \theta_2 \frac{d\theta_2}{d\theta'} = m_1 \frac{(m_1 + m_2 \cos \theta')}{(m_2 + m_1 \cos \theta')^2}.$$

В результате находим

$$q(\theta) = q(\theta') \frac{\sec^2 \theta (m_2 + m_1 \cos \theta')^2}{m_1 (m_1 + m_2 \cos \theta')^2}. \quad (21.19)$$

Для вычисления поперечного сечения рассеяния как функции θ необходимо исключить θ' с помощью уравнения (21.18).

13. Обсуждение результатов.

Случай А: $m_2 < m_1$.

Это случай, когда падающие частицы легче, чем рассеивающие частицы. Из уравнения (21.18) видно, что при малых θ будем иметь

$$\theta \cong \frac{m_1}{m_1 + m_2} \theta'. \quad (21.20)$$

При больших θ связь между θ и θ' довольно сложная. Например, если $\cos \theta' = -m_2/m_1$, то $\theta = \pi/2$. Это всегда осуществляется при $\theta' > \pi/2$. Максимальный угол рассеяния θ всегда равен π .

Случай Б: $m_2 > m_1$.

В этом случае, как легко видеть, максимальное значение θ меньше чем $\pi/2$. Уравнение (21.20) по-прежнему имеет место при малых углах θ .

Случай В: $m_2 = m_1$.

Здесь получается $\theta = \theta'/2$. Тогда максимум θ равен $\pi/2$. Угол в лабораторной системе равен как раз половине угла в системе центра инерции.

Задача 3. Может показаться, что есть резкий разрыв в форме поперечного сечения рассеяния, так как в случае $m_1 = m_2$ максимальное значение $\theta = \pi/2$, а при m_2 , лишь слегка меньшем m_1 , максимальное значение θ внезапно возрастает до значения π . Показать, что физически здесь нет никакого фактического разрыва, поскольку поперечное сечение рассеяния $q(\theta)$ стремится к нулю для углов, больших $\pi/2$, когда m_2 приближается к m_1 .

Очень часто есть возможность измерить угол отдачи θ_2 рассеивающей частицы. Из уравнения (21.18) находим, что

$$\theta_1 = -\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta'}{2}\right).$$

14. Столкновение тождественных частиц. Если обе частицы одинаковы, то нельзя отличить неподвижную частицу от той, которая первоначально двигалась. Поэтому надо добавить к $q(\theta')$ поперечное сечение рассеяния для процесса столкновения, при котором в системе центра инерции обстреливаемая частица рассеивается на угол $\pi - \theta'$. Если обратиться к рис. 102, то мы увидим, что такая частица добавится к потоку рассеянных частиц таким же образом, как если бы это была первоначальная частица, рассеянная на угол θ . Следовательно, поперечное сечение рассеяния $q(\theta')$ следует заменить на $q(\theta') + q(\pi - \theta')$.

15. Квантовая теория рассеяния. При квантовомеханической трактовке задачи рассеяния надо учитывать, что движущиеся частицы нельзя описать классически определенными траекториями, а вместо них следует воспользоваться волновыми пакетами, средние значения координат которых дают классические траектории. Таким образом, процесс рассеяния должен быть описан волновыми функциями, которые являются решениями классических уравнений движения.

16. Условие применимости классической теории рассеяния. Можно легко получить условие, при котором классическая теория становится неприменимой и необходимо воспользоваться квантовой теорией. В тех случаях, когда классическое описание допустимо, возможно получить его с помощью волновых пакетов без существенного изменения основных результатов. Так как угол рассеяния для какой-то определенной траектории в основном определяется величиной силы, соответствующей расстоянию между частицами при их наибольшем сближении, то волновой пакет должен быть во всяком

случае уже, чем это расстояние. В противном случае мы не сможем быть уверены, что частица действительно испытывает действие определенной предсказанной силы, с помощью которой можно классическим способом вычислить отклонение.

Для получения грубого критерия справедливости классического описания процессов атомных столкновений можно с уверенностью предположить, что расстояние наибольшего сближения и параметр столкновения b имеют один порядок величины. Чтобы образовать волновой пакет, который меньше b , конечно, необходимо воспользоваться областью длин волн порядка b или меньше. Следовательно, прежде всего необходимо, чтобы импульс падающих частиц был значительно больше чем $p \cong \hbar/2b$. Кроме того, при определении положения этого пакета мы делаем импульс частицы неопределенным на величину, значительно большую чем $\delta p \cong \hbar/2b$. Эта неопределенность повлечет за собой неопределенность угла отклонения на величину, значительно большую чем $\delta\theta \cong \delta p/p$. Классическое описание применимо, если эта неопределенность намного меньше, чем само отклонение. В противном случае станет бессмысленным вычисление отклонения классическими методами. Но это требование эквивалентно требованию, чтобы неопределенность импульса была гораздо меньше, чем весь импульс Δp , передаваемый при столкновении, или чтобы имело место неравенство

$$\frac{\delta p}{\Delta p} \cong \frac{\hbar}{2b \Delta p} \ll 1. \quad (21.21a)$$

Импульс Δp следует определить с помощью теории классических траекторий. Общее рассмотрение задачи рассеяния на произвольно большие углы довольно сложное, но для случая, когда угол отклонения мал, можно пользоваться классической теорией возмущений. Последняя применима, только когда угол рассеяния велик по сравнению с квантовыми флуктуациями, но мал по сравнению с π . Тогда Δp можно вычислить, пользуясь формулами п. 8, что дает

$$\Delta p \cong b \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(r) dt}{r} \cong \frac{b}{v} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(r) dx}{r},$$

где, как и в п. 8, полагаем

$$r = \sqrt{b^2 + x^2}.$$

Следовательно, классическое описание будет справедливо для всех случаев, когда *)

$$\frac{2b \Delta p}{\hbar} = \frac{2b^2}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(r) dx}{r} \gg 1 \quad (\text{для малых отклонений}). \quad (21.21б)$$

*) Заметим, что большая сила благоприятствует применимости классического приближения.

В пп. 35 и 38 мы рассмотрим некоторые применения этого критерия.

17. Квантовое описание процесса рассеяния. Мы видели, что классическая теория требует знания траектории, для каждой точки которой можно вычислить передачу импульса от частицы. Однако в квантовой теории частица не может обладать определенным импульсом, если точно определена ее координата, поэтому процесс рассеяния нельзя рассматривать классически. Вместо этого мы можем выбрать либо импульсное, либо координатное представление, но не то и другое одновременно.

Если выбрать первое, то надо пользоваться волновой функцией импульсного представления (гл. 9, п. 8), и это соответствует так называемому «причинному»*) описанию процесса рассеяния (гл. 8, пп. 13 и 14). Другими словами, можно рассматривать отклонение как нечто обусловленное отклоняющей силой, но нельзя точно определить, где именно произошла передача импульса внутри области, занятой волновым пакетом. Наоборот, нужно считать, что все части пространственно распределенного потенциала в объеме волнового пакета одновременно вносят свою долю в процесс рассеяния. Это аналогично опытам Дэвиссона и Джермера с дифракцией электронов (гл. 3, п. 11), где надо предположить, что все части кристалла участвуют одновременно в изучаемом явлении.

Как мы уже установили, математический аппарат квантовой механики требует в данном случае применения волновой функции в импульсном представлении. Рассмотрим частицу с начальным импульсом $\mathbf{p}_0$; в результате действия рассеивающего потенциала она будет иметь новый импульс $\mathbf{p}$. При упругих столкновениях**) равны абсолютные значения $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}_0$ и, следовательно, энергия сохраняется; однако в более общем случае это не обязательно. Импульс, передаваемый при столкновении, равен $\Delta \mathbf{p} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_0$. Для упругих столкновений (см. рис. 103)

$$\Delta p = 2p \sin \frac{\theta}{2}, \quad (21.22)$$

где θ — угол отклонения. Таким образом, вероятность рассеяния под данным углом θ определится, если предварительно найдена вероятность для соответствующей передачи импульса $\Delta \mathbf{p}$.

*) Напоминаем здесь, что этот термин заимствован из боровского представления дополнительности. В действительности в обоих представлениях мы имеем дело с объективным описанием процесса рассеяния. — *Прим. ред.*

**) Это утверждение применимо и для бесконечно тяжелого рассеивающего центра, а также и для более общего случая — в координатной системе, связанной с центром инерции при произвольном рассеивающем центре. В последнем случае надо пользоваться приведенными массой и энергией (см. пп. 12 и 13).

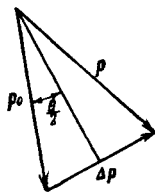


Рис. 103.

Другой способ описания процесса рассеяния получается с помощью волновых представлений и дает так называемое пространственно-временное описание его (см. гл. 8, п. 14)*). При этом способе описания начинают с рассмотрения падающего волнового пакета, который очень велик по сравнению с размерами рассеивающей системы. Такой пакет создается при пропускании падающих частиц через коллимационную щель. Время прохождения частиц сквозь эту щель при нормальных экспериментальных условиях довольно трудно определить по сравнению со временем, необходимым для прохождения частицы через область с заметным значением рассеивающего потенциала. Поэтому будет достаточно хорошим приближением, если заменить фактический волновой пакет падающей плоской волной бесконечной протяженности. Схематически это изображено на рис. 104.

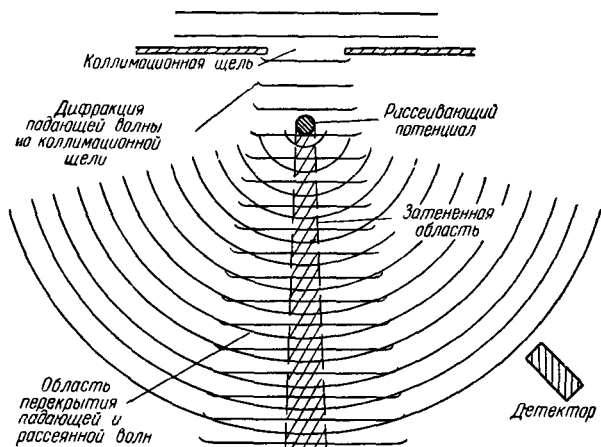


Рис. 104.

Когда волновой пакет проходит через коллимационную щель, он слегка дифрагирует около краев, но так как щель обычно намного шире электронной длины волны, то этой дифракцией можно пренебречь. Волна, вступая в область рассеивающего потенциала, попадает в область пространства с переменным показателем преломления (см. гл. 11, п. 2), где она и преломляется и дифрагирует. Если показатель преломления изменяется мало на расстоянии порядка длины волны (т. е. потенциал изменяется плавно и медленно), то справедливо приближение ВКБ (см. гл. 12) и дифракцией можно пренебречь. Другими словами, кривизну фронта волны можно опи-

*) См. предыдущее примечание редактора.

сать при помощи искривления лучей, которые нормальны к фронту волны и, конечно, представляют собой точные классические траектории частиц. В этом случае можно пользоваться классическим приближением. Но если потенциал существенно изменяется на протяжении длины волны, то уже несправедливо приближение ВКБ и наблюдаются характерные дифракционные эффекты. Если кривая потенциальной энергии имеет прямые углы, то может быть также и отражение (гл. 11, п. 4). Но в любом случае существенно волновое описание.

Независимо от того, правильно ли классическое или квантовомеханическое описание, возникает рассеянная волна. Интенсивность рассеянной волны определяет вероятность того, что частица рассеется под данным углом. Там, где падающая и рассеянная волны перекрываются, они могут интерферировать. Эта область интерференции включает, во-первых, «тень» от рассеивающего потенциала, т. е. область, в которой падающая волна ослабляется из-за самого появления рассеянной волны, и, во-вторых, область, где падающая и рассеянная волны перекрываются. Так как рассеивающее тело обычно содержит много атомов, то затененной областью будет, грубо говоря, область, расположенная непосредственно позади мишени. Для ясного отличия рассеянной волны от падающей необходимо поместить детектор где-то вне области, доступной для падающей волны, как это показано на рис. 104.

Все изложенное выше описывает процесс рассеяния в координатном представлении. Однако это было достигнуто ценой отказа от детального описания того, как электрон изменяет свой импульс. Поскольку дело касается определения вероятности рассеяния под определенным углом, то, конечно, описание в координатном представлении должно дать те же результаты, что и описание в импульсном представлении*), но каждый из этих способов существенно отличен при описании промежуточного механизма рассеяния. Только в случае, если бы удалось образовать волновой пакет значительно меньший, чем расстояние наибольшего сближения, не внося существенных неопределенностей в угол рассеяния, можно было бы дать одновременно детальное (в классическом смысле) и причинное описание. В противном случае надо считать, что процесс рассеяния состоит из квантовых процессов. Этот квантовый характер выражается в том, что любая попытка детально пронаблюдать за процессом рассеяния приводит к квантам, которые сообщают частице импульс, достаточный для изменения угла рассеяния на заметную, но не полностью предсказываемую и контролируемую величину**).

*) Как это показано, например, в гл. 8, пп. 13 и 14.

**) См. гл. 5, п. 4, где описываются аналогичные эффекты, возникающие при попытке проследить за движением электрона на его орбите.

18. Рассеяние как процесс перехода между различными состояниями в пространстве импульсов. Начнем с квантовомеханической трактовки задачи рассеяния в импульсном представлении. При этом рассеивающий потенциал рассматривается как причина, обуславливающая процессы перехода из одного состояния в пространстве импульсов в другое. Для описания состояния системы перед рассеянием частицы надо построить падающий волновой пакет, который охватывает малую область импульсов, сконцентрированных около некоторого определенного значения p_0 . Эта область обычно настолько мала, что на практике можно заменить волновую функцию в пространстве импульсов δ -функцией, т. е.

$$\varphi_0(p) = \delta(p - p_0).$$

Следовательно, в координатном пространстве начальная функция представляет собой плоскую волну

$$\psi = L^{-3/2} e^{i p_0 r / \hbar}$$

(множитель $L^{-3/2}$ необходим для нормировки волновой функции). С течением времени появляются другие импульсы, и в общем случае волновую функцию надо представлять как интеграл Фурье, охватывающий все возможные импульсы. Однако удобнее пользоваться рядами Фурье, считая функцию ψ периодической в пределах большой основной области с линейным размером L , где L — настолько большая величина, что границы этой основной области будут оказывать ничтожное влияние на процесс рассеяния. Так же как и в задаче электромагнитного излучения (см. гл. 1, п. 4), мы пользуемся периодическими граничными условиями на границах основной области. Тогда любая функция может быть разложена в ряд Фурье следующим образом:

$$\psi = L^{-3/2} \sum_p a_p e^{i p r / \hbar}. \quad (21.23a)$$

Допустимыми значениями p будут такие, которые делают функцию пространственно периодической с периодом, равным L , т. е. $p_x = 2\pi\hbar l/L$, $p_y = 2\pi\hbar m/L$, $p_z = 2\pi\hbar n/L$ (l , m и n — произвольные целые числа). Для определения вероятности изменения импульса надо воспользоваться уравнением Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi.$$

Подставляя ряд (21.23a) в уравнение Шрёдингера, находим

$$\sum_p i\hbar \frac{\partial a_p}{\partial t} e^{i p r / \hbar} = \sum_p \left[\frac{p^2}{2m} + V(r) \right] a_p e^{i p r}. \quad (21.23б)$$

Умножаем теперь это уравнение на $L^{-3/2}e^{-i\mathbf{p}'\mathbf{r}/\hbar}$ и проинтегрируем по всему объему основной области. Используя свойства ортогональности и нормировки экспоненциальных функций, получаем

$$i\hbar \frac{\partial a_{\mathbf{p}}}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} a_{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{p}'} L^{-3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}') a_{\mathbf{p}'}, \quad (21.24)$$

где

$$V(\mathbf{p} - \mathbf{p}') = \int e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\mathbf{r}/\hbar} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (21.25)$$

Это и есть уравнение Шрёдингера в импульсном представлении*). Так как при увеличении размеров основной области до бесконечности сумма по $\mathbf{p}'$ в уравнении (21.24) заменяется интегралом, то это по существу интегро-дифференциальное уравнение. Итак, мы видим, что форма уравнения Шрёдингера сильно зависит от представления, которым мы пользуемся.

Теперь удобно сделать подстановку

$$a_{\mathbf{p}'} = C_{\mathbf{p}'} e^{-iE_{\mathbf{p}'}t/\hbar},$$

где

$$E_{\mathbf{p}'} = \frac{(p')^2}{2m}.$$

Тогда уравнение (21.24) примет вид

$$i\hbar \dot{C}_{\mathbf{p}} = L^{-3} \sum_{\mathbf{p}'} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}') C_{\mathbf{p}'} e^{i(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}'})t/\hbar}. \quad (21.26)$$

Уравнение (21.26) совпадает с тем уравнением, которым мы пользовались в методе вариации постоянных (см. уравнение (18.6)). Действительно, мы могли получить его и непосредственно из уравнения (18.6), но в некоторых отношениях более поучительно получить его, переходя к импульсному представлению.

19. Борновское приближение. Теория возмущений. Если рассеивающий потенциал невелик, то рассматриваемую задачу можно решить с помощью теории возмущений, положив, что в некоторый начальный момент времени $t=0$ $C_{\mathbf{p}_0}=1$, в то время как все другие коэффициенты $C_{\mathbf{p}}$ в этот момент равны нулю. С точностью до членов первого порядка малости можно тогда определить $C_{\mathbf{p}}$, подставляя $C_{\mathbf{p}_0}=1$ и $C_{\mathbf{p}}=0$ в правую часть уравнения (21.26). Это дает

$$i\hbar \dot{C}_{\mathbf{p}} = L^{-3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) e^{i(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}_0})t/\hbar}. \quad (21.27)$$

Принятое приближение эквивалентно предположению, что падающая волна не искажается существенно рассеивающим потенциалом. Такое

*) Это уравнение можно было бы получить и непосредственно, переходя к импульсному представлению (см. уравнение (16.42)).

предположение, которое по существу заключается в допущении применимости теории возмущения для случая задачи рассеяния, называется борновским приближением.

Для определения вероятности рассеяния проинтегрируем уравнение (21.27). Полагая $C_p = 0$ при $t = 0$, получаем

$$C_p = V(p - p_0) L^{-3} \frac{[e^{i(E_p - E_{p_0})t/\hbar} - 1]}{(E_p - E_{p_0})}, \quad (21.28a)$$

$$|C_p|^2 = 4L^{-6} |V(p - p_0)|^2 \frac{\sin^2[(E_p - E_{p_0})t/2\hbar]}{(E_p - E_{p_0})^2}. \quad (21.28b)$$

Эти выражения определяют вероятность перехода из начального состояния с импульсом p_0 в конечное состояние с импульсом p в момент t . Величина $|C_p|^2$ равна вероятности того, что осуществилось соответствующее отклонение.

Сделаем ряд замечаний в связи с полученным уравнением. Следует прежде всего сказать, что принятые граничные условия слишком абстрактны, ибо им соответствует выбор плоской волны бесконечной протяженности. Это означает, что при $t = 0$ падающая плоская волна занимает все пространство, *включая и само рассеивающее тело*. В действительности необходимо иметь дело с волновым пакетом, который первоначально не соприкасается с рассеивающим телом. Однако в п. 29 мы увидим, что использование таких неправильных граничных условий приводит тем не менее к несущественным ошибкам в расчетах.

Кроме того, существенно заметить, что при заданном значении импульса p вероятность рассеяния для малых времен пропорциональна t . Этот результат очень напоминает результат, с которым мы встречались уже в теории излучения (см. гл. 2, п. 16 и гл. 18, п. 18). Пути решения этих двух задач также очень близки. Фактически надо интегрировать по области энергий падающей частицы, и это интегрирование дает вероятность перехода, которая пропорциональна времени. Однако в этом случае тот же результат можно получить иным путем, который более нагляден, а именно вводя определенный начальный импульс p_0 и суммируя по области конечных энергий $E_p = p^2/2m$.

При рассмотрении области конечных энергий надо воспользоваться тем, что основная область очень велика. Тогда соседние значения p настолько близки друг к другу, что ни одна из величин, входящих в сумму, существенно не изменяется при переходе p к соседнему значению. Поэтому сумму можно заменить интегралом. При этом заметим, что при суммировании по небольшому интервалу состояний $dp_x dp_y dp_z$ мы имеем дело со следующим числом состояний:

$$\delta N = \rho(p) dp_x dp_y dp_z,$$

где $\rho(\mathbf{p})$ — плотность состояний в пространстве импульсов. Тогда полная вероятность того, что частица совершит переход в интервал $dp_x dp_y dp_z$, равна

$$dP = \rho(\mathbf{p}) |C_{\mathbf{p}}|^2 dp_x dp_y dp_z, \quad (21.29a)$$

где величина $|C_{\mathbf{p}}|^2$ может быть взята из выражения (21.28б).

Плотность состояния в $\mathbf{k}$ -пространстве дается уравнением (1.26) и равна

$$dN = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 dk_x dk_y dk_z.$$

Заменяя $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$, получаем

$$dN = \left(\frac{L}{\hbar}\right)^3 dp_x dp_y dp_z$$

и

$$\rho(\mathbf{p}) = \left(\frac{L}{\hbar}\right)^3.$$

Теперь удобно перейти к полярным координатам в пространстве импульсов, тогда выражение (21.29a) принимает вид

$$dP = \rho(\mathbf{p}) |C_{\mathbf{p}}|^2 p^2 dp d\Omega = \left(\frac{L}{\hbar}\right)^3 |C_{\mathbf{p}}|^2 p^2 dp d\Omega. \quad (21.29б)$$

Это выражение определяет вероятность того, что частица совершает переход в состояние с импульсом $\mathbf{p}$, направление которого лежит внутри телесного угла $d\Omega$. Однако импульс удобно заменить энергией, используя соотношения

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \text{и} \quad dP = \sqrt{\frac{m}{2E}} dE.$$

Тогда получаем

$$dP = m \sqrt{2Em} \rho(\mathbf{p}) |C_{\mathbf{p}}|^2 dE d\Omega = |C_{\mathbf{p}}|^2 \rho(E) dE d\Omega, \quad (21.29в)$$

где

$$\rho(E) = m \sqrt{2mE} \rho(\mathbf{p}) = m^2 v \rho(\mathbf{p}), \quad (21.29г)$$

v — скорость частицы.

Подставляя $|C_{\mathbf{p}}|^2$ из уравнения (21.28б) в (21.29в), имеем

$$dP = 4L^{-6} \rho(E) |V(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)|^2 \frac{\sin^2 [(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}_0})t/2\hbar]}{(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}_0})^2} dE_{\mathbf{p}} d\Omega. \quad (21.29д)$$

Мы видим, что последнее выражение содержит множитель

$$\frac{\sin^2 (E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}_0})t/2\hbar}{(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}_0})^2}.$$

Как показано в гл. 2, п. 16, этот множитель при больших t имеет δ -образный вид, как функция $E_p - E_{p_0}$. Это означает, что хотя всегда существует некоторая вероятность перехода в состояния с энергией E_p , но для больших времен с подавляющей вероятностью будут осуществляться переходы на уровни, где энергия сохраняется с точностью $\Delta E \cong \hbar/t$, с которой эту энергию вообще можно определить. Следовательно, большинство переходов будет происходить в очень малом интервале энергий вблизи значения $E_p = E_{p_0}$. Этот интервал с течением времени становится все более узким (в предположении, конечно, что столкновения упругие).

Так как $V(p - p_0)$ и $\rho(E)$ — плавно меняющиеся функции, то они остаются практически постоянными внутри узкой области, где подынтегральное выражение велико, поэтому их можно вынести за знак интеграла для значения энергии $E_p = E_{p_0}$. Тогда вероятность рассеяния в интервале телесного угла $d\Omega$ будет равна

$$\delta P = 4L^{-6} \rho(E_{p_0}) |V(p - p_0)|^2 d\Omega \int_0^\infty \frac{\sin^2 [(E_p - E_{p_0})t/2\hbar]}{(E_p - E_{p_0})^2} dE_p. \quad (21.30a)$$

В согласии с законом сохранения энергии, как это отмечалось в предыдущем пункте, $|V(p - p_0)|$ надо вычислить при $E_p = E_{p_0}$ или при $|p| = |p_0|$. Направление вектора p может, конечно, отличаться от направления p_0 .

Так как подынтегральное выражение будет, как правило, ничтожно мало для отрицательных значений E_p , то мы можем, как это делалось в гл. 2, п. 16, упростить результат, распространив пределы интегрирования на весь интервал от $-\infty$ до ∞ . Тогда, сделав подстановку $(E_p - E_{p_0})t/2\hbar = x$, получаем

$$\begin{aligned} \delta P &= 4L^{-6} \rho(E_{p_0}) |V(p - p_0)|^2 \frac{d\Omega t}{2\hbar} \int_{-\infty}^\infty \frac{\sin^2 x dx}{x^2} = \\ &= \frac{2\pi \rho(E_{p_0})}{\hbar} L^{-6} |V(p - p_0)|^2 t d\Omega. \end{aligned} \quad (21.30б)$$

Этот результат имеет весьма широкое применение. В любой задаче, в которой осуществляются переходы в непрерывную область конечных состояний с плотностью $\rho(E)$, получается следующий результат:

$$\delta P = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E) |W_{1,2}|^2 t d\Omega, \quad (21.30в)$$

где $W_{1,2}$ — матричный элемент между двумя состояниями, определяемый соотношением $W_{1,2} = \int \psi_1^* V \psi_2 d\mathbf{r}$, где ψ_1 и ψ_2 — нормированные волновые функции соответственно начального и конечного со-

стояний. Из уравнения (21.25) мы видим, что в нашем случае $W_{1,2} = L^{-3} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)$.

Подставляя вместо $\rho(E)$ его значение из выражения (21.29г), находим для вероятности перехода в единицу времени

$$\frac{\delta P}{t} = \frac{4\pi^2 m^2 v}{\hbar^4} L^{-3} |V(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)|^2 d\Omega. \quad (21.31)$$

20. Вычисление поперечного сечения. При вычислении поперечного сечения заметим, что последнее также может быть выражено через вероятность рассеяния в единицу времени. Согласно п. 6, вероятность рассеяния в элементе телесного угла $d\Omega$ на расстоянии dx равна

$$\delta P = \rho \sigma d\Omega dx,$$

где ρ — плотность рассеивающего вещества.

Заменяя $dx = v dt$, получаем (полагая, что $dt = t$ — малый интервал времени)

$$\frac{\delta P}{t} = \rho v \sigma d\Omega. \quad (21.32)$$

Здесь мы рассматривали задачу, когда в объеме основной области L^3 находится одна частица. Следовательно, $\rho = L^{-3}$,

$$\frac{\delta P}{t} = v \sigma L^{-3} d\Omega.$$

Сравнивая это выражение с уравнением (21.31), находим

$$\sigma = |V(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)|^2 \frac{4\pi^2 m^2}{\hbar^4}. \quad (21.33a)$$

Последнее выражение не зависит от размеров основной области, что, конечно, вполне разумно.

Если $V(\mathbf{r})$ обладает сферической симметрией, то можно показать, что $V(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)$ является функцией только $|\mathbf{p} - \mathbf{p}_0|$ и не зависит от направления вектора $\mathbf{p} - \mathbf{p}_0$.

Задача 4. Доказать это утверждение.

Величины $|\mathbf{p} - \mathbf{p}_0|$ можно выразить через угол рассеяния, используя уравнение (21.22):

$$\sigma = \left| V\left(2p \sin \frac{\theta}{2}\right) \right|^2 \frac{4\pi^2 m^2}{\hbar^4}. \quad (21.33b)$$

Заметим, что поперечное сечение определяется через коэффициенты разложения потенциала в ряд Фурье. Это служит конкретной иллюстрацией того факта, что при квантовом описании процесса рассеяния весь потенциал действует как целое, а не только та его часть,

которая охватывает частицу, если бы последняя двигалась по траектории. Это объясняется тем, что частица фактически описывается волновым пакетом, а не классической частицей с определенной траекторией. В квантовой области мы имеем дело с волновым пакетом, покрывающим весь рассеивающий атом. В противном случае (т. е. если размеры пакета будут меньше), согласно п. 16, неопределенность импульса, обусловленная более точным определением «орбиты», нарушит всю картину рассеяния. Только в том случае, когда выполняется критерий (21.21б), можно пользоваться в задаче рассеяния представлением о классической орбите.

21. Конкретный пример рассеяния на экранированном кулоновском потенциале. В виде иллюстрации применим полученные выше результаты к случаю экранированного кулоновского потенциала

$$V = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right). \quad (21.34a)$$

Мы должны вычислить прежде всего матричный элемент

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = Z_1 Z_2 e^2 \int \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \exp i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \mathbf{r} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{r}.$$

Вычисляя этот интеграл, получим

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|^2 + \left(\frac{1}{r_0}\right)^2}. \quad (21.34б)$$

Задача 5. Получить это выражение.

Окончательный результат для поперечного сечения рассеяния имеет вид

$$\sigma = \frac{4m^2 (Z_1 Z_2)^2 e^4}{\left(4p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \frac{\hbar^2}{r_0^2}\right)^2}. \quad (21.35)$$

При $r_0 \rightarrow \infty$, т. е. когда экранирование отсутствует, имеем

$$\sigma = \frac{m^2 (Z_1 Z_2 e^2)^2}{4p^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{16E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (21.36a)$$

Эта формула точно совпадает с формулой Резерфорда, выведенной в классической теории (см. уравнение (21.16в)). Полное совпадение между этими двумя выражениями для всех углов рассеяния является специфическим свойством кулоновского потенциала. При произвольном виде потенциала рассеяния, как мы увидим в п. 38, классические и квантовые результаты не совпадают.

Общий характер зависимости поперечного сечения от угла рассеяния для экранированного кулоновского потенциала изображен на рис. 105. Кривая $\sigma(\theta)$ монотонно возрастает с убыванием θ , что характерно для резерфордовского поперечного сечения, вплоть до значения угла, определяемого равенством

$$\sin \frac{\theta_0}{2} \cong \frac{\hbar}{2pr_0}. \quad (21.366)$$

Для углов, меньших чем θ_0 , рост σ сравнительно невелик. Следовательно, угол θ_0 можно рассматривать как своего рода минимальный угол, ниже которого резерфордовское рассеяние подавляется эффектами экранирования.

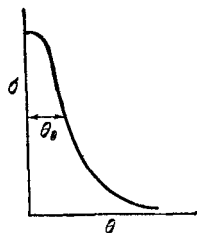


Рис. 105.

22. Связь между борновским приближением и коэффициентами разложения потенциала в ряд Фурье.

Уравнения (21.25) и (21.33а) показывают, что поперечное сечение зависит только от абсолютного значения коэффициента Фурье для потенциала, соответствующего разности волновых чисел

$$|k - k_0| = \frac{2p}{\hbar} \sin \frac{\theta}{2} = \frac{2\sqrt{2mE}}{\hbar} \sin \frac{\theta}{2}. \quad (21.37)$$

Это означает, что с помощью разложения потенциала рассеяния в ряд Фурье можно детально изучить зависимость поперечных сечений рассеяния от энергии и угла и тем самым получить хорошее представление об области действия и форме потенциала *при условии, что справедливо борновское приближение*. Как будет показано в п. 39, и в том случае, когда борновское приближение несправедливо, можно получить те же сведения, но для этого требуется совершить более сложные расчеты.

Очень важным свойством процессов рассеяния является возможность данного изменения импульса $\Delta p = p - p_0$ только в случае, когда потенциал имеет такую форму, что в его разложении существует соответствующий коэффициент Фурье. Поэтому, например, можно получить очень большие отклонения, вызванные очень малой силой, при условии, что эта сила достаточно быстро изменяется в пространстве. Последнее может быть, например, в том случае, когда область, где потенциал велик, достаточно узка. Тогда маленькая сила будет приводить лишь к малой *вероятности* отклонения. Это совершенно не согласуется с классической теорией, которая утверждает, что для больших отклонений, создаваемых в малых областях пространства, всегда требуются большие силы.

Как согласовать эти два противоположных вывода? Вспомним, что в борновском приближении процесс рассеяния описывается как квантовый переход из состояния с одним значением импульса

в состояние с другим импульсом. То, что имеет место только один переход, содержится уже в уравнении (21.27), из которого следует, что данное $\dot{C}_p$ всегда получается только из начального коэффициента C_{p_0} , а не из каких-либо других C_p . Однако в более высоких приближениях можно было бы получить процессы, в которых частица претерпевает много последовательных элементарных отклонений от *одного и того же* атома. Это можно было бы описать в рамках теории возмущений, переходя ко второму или более высоким приближениям, так как последнее показало бы, как данное значение $\dot{C}_p$ создается не только из состояния с p_0 , но также и из других коэффициентов C_p первого приближения, которые сами возникали в результате процессов рассеяния первого приближения. В общем случае большой потенциал ухудшает условия применимости теории возмущений и, следовательно, благоприятствует множественному характеру процесса рассеяния. Если имеется достаточное число последовательных отклонений, то процесс рассеяния практически становится непрерывным и будет приближаться по своему характеру к классическому рассеянию. Таким образом, мы здесь с иных позиций*) вновь показали, что большая сила благоприятствует классическому характеру поведения микрочастиц. Мы увидели также, как возникает, несмотря на квантовую природу элементарных процессов отклонения, кажущееся непрерывным классическое рассеяние.

23. Примеры: сравнение поперечных сечений для гауссовского потенциала и прямоугольной ямы. Для иллюстрации того, как можно исследовать форму потенциала с помощью процесса рассеяния, сравним между собой поперечные сечения, возникающие при рассеянии на двух различных потенциалах:

$$V = V_0 \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \right] \quad (\text{гауссовский потенциал}),$$

$V = V_0$ при $r < r_0$ и $V = 0$ при $r > r_0$ (прямоугольная яма).

Прежде всего получим общее выражение для коэффициентов Фурье сферически симметричного потенциала V . Введем полярные координаты r, α, β . Тогда искомые коэффициенты Фурье будут равны

$$V(k - k_0) = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} V(r) e^{i(k - k_0)r} r^2 \sin \alpha \, dr \, d\alpha \, d\beta. \quad (21.38a)$$

Выберем ось z по направлению вектора $k - k_0$, тогда

$$(k - k_0)r = |k - k_0| r \cos \alpha.$$

*) В п. 16 было показано, что большая сила благоприятствует справедливости классического приближения.

Интеграл по β легко вычисляется; он равен 2π , а интеграл по α дает

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = \frac{2\pi}{i|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|} \int_0^\infty V(r) (e^{i|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|r} - e^{-i|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|r}) r dr. \quad (21.386)$$

Если $V(r)$ — четная функция r , то

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = \frac{2\pi}{i|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|} \int_{-\infty}^\infty V(r) e^{i|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|r} r dr. \quad (21.38в)$$

Для гауссовского потенциала получаем

$$\begin{aligned} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) &= \frac{2\pi V_0}{i|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|} \int_{-\infty}^\infty \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{r^2}{r_0^2} + i|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|r \right] r dr = \\ &= (2\pi)^{3/2} r_0^3 V_0 e^{-1/2 |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|^2 r_0^2}. \end{aligned} \quad (21.39a)$$

Для потенциала в виде прямоугольной ямы находим

$$\begin{aligned} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) &= \frac{2\pi V_0}{i|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|} \int_{-r_0}^{r_0} e^{i|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|r} r dr = \\ &= -\frac{4\pi V_0}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|^2} \left(r_0 \cos |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| r_0 - \frac{\sin |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| r_0}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|} \right). \end{aligned} \quad (21.396)$$

Задача 6. Доказать полученные формулы.

Обсуждение полученных результатов. Из уравнения (21.37) получаем

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| = \frac{2p}{\hbar} \sin \frac{\theta}{2},$$

где θ — угол отклонения. Поэтому малое значение $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$ соответствует либо малым отклонениям, либо малым импульсам (медленные частицы). Мы видим, что для малых $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$ в обоих рассматриваемых случаях, так же как и в случае рассеяния на экранированном кулоновском потенциале (уравнение (21.35)), имеет место следующее равенство:

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cong V(0) + \frac{V''(0)}{2} |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|^2 = V(0) + \frac{V''(0)}{2\hbar^2} \left(2p \sin \frac{\theta}{2} \right)^2.$$

Другими словами, в этих случаях отсутствует член, линейный относительно $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$. (Это можно проверить для каждого случая непосредственным разложением потенциала.) Следовательно, для очень малых импульсов поперечное сечение не сильно зависит от угла.

Импульс, при котором поперечное сечение начинает заметно зависеть от угла, определяется формулой

$$\left| \frac{V''(0)}{V(0)} \right| \frac{|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|^2}{2} \cong 1. \quad (21.40)$$

В большинстве случаев это получается, когда $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| r_0 \cong 1$ или $p \sin \frac{\theta}{2} \cong \frac{\hbar}{2r_0}$. Следовательно, заметная угловая зависимость начинает осуществляться только для импульсов, превышающих величину $2\hbar/r_0$. А этот импульс будет порядка импульса, который, согласно соотношению неопределенностей, соответствует локализации частицы в объеме пространства с линейными размерами порядка r_0 .

Когда величина $|\mathbf{k}_0|$ становится настолько большой, что $|\mathbf{k}_0| r_0 \cong 1$, т. е. когда падающая волна достаточно коротка, так что она заметно колеблется при прохождении через область большого потенциала, то рассеянная волна начинает зависеть от угла. Пока $|\mathbf{k}_0| r_0 \cong 1$, практически невозможно отличить один потенциал от другого. Только при больших значениях $|\mathbf{k}|$ поперечное сечение рассеяния начинает сильно зависеть от формы потенциала, например, в случае гауссовской ямы мы получаем для больших $|\mathbf{k}_0|$ быстрый, но монотонный спад

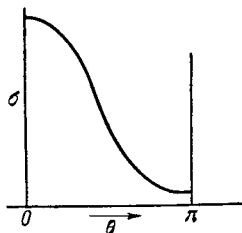


Рис. 106.

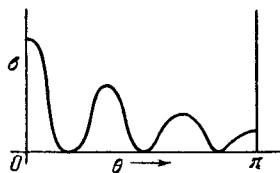


Рис. 107.

поперечного сечения с ростом угла, как показано на рис. 106. Для квадратной ямы поперечное сечение хотя и убывает с ростом θ , но при этом совершает затухающие колебания. Типичное поведение в этом случае при больших $|\mathbf{k}|$ хорошо видно из рис. 107. Колебания σ обусловлены в данном случае действием острых «краев» потенциальной ямы. Если края ямы сгладить, то коэффициенты Фурье изменялись бы более регулярно и в результате получилась бы картина рассеяния, напоминающая рассеяние на гауссовском потенциале.

Во всяком случае ясно, что, изучая угловую зависимость σ при больших $|\mathbf{k}|$, можно получить с помощью этого метода много сведений о форме поперечного сечения, если, конечно, можно с достаточным основанием пользоваться приближением Борна. (Условия применимости борновского приближения будут обсуждены в п. 31.) Чем более тонкие детали формы потенциала желательно обнаружить, тем до больших значений $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$ необходимо пойти в разложении Фурье. Сле-

довательно, требуется переходить ко все более высоким импульсам падающих частиц.

24. Исследование процесса рассеяния в координатном представлении. Обратимся теперь ко второму способу рассмотрения проблемы рассеяния, а именно к волновому описанию процесса рассеяния. В импульсном представлении оказалось более удобным решать задачу в рамках теории возмущений, зависящей от времени. Однако при рассмотрении этой задачи в координатном представлении оказывается удобнее начать решение с волновых функций стационарных состояний и лишь позже определить временную зависимость, образуя волновые пакеты более или менее так, как это было уже сделано в случае задачи о движении свободной частицы (гл. 3, п. 2) или резонансного захвата частиц в потенциальной яме (гл. 11, п. 17). При таком решении начинают с изучения падающей волны. Часть этой волны отклоняется так, как было описано в п. 17, и по интенсивности рассеянной волны можно вычислить вероятность рассеяния. Конечно, в действительности падающая волна представляет собой пакет в том смысле, что она ограничена в пространстве и имеет конечную протяженность во времени. Однако размеры волнового пакета по сравнению с атомом настолько велики, что мы допустим ничтожную ошибку, предположив падение плоской волны бесконечной протяженности, описываемой волновой функцией

$$\psi_0 = e^{ik_0 r}.$$

Когда падающая волна проникает в область рассеивающего потенциала, то возникает рассеянная волна, которую мы обозначим через $g(\mathbf{r})$. Полная волновая функция будет тогда равна

$$\psi = e^{ik_0 r} + g(\mathbf{r}). \quad (21.41a)$$

Так как падающий и отраженный пучки остаются стационарными, то все вероятности не зависят от времени, и поэтому полная зависящая от времени волновая функция будет равна

$$\Psi = \psi e^{-iEt/\hbar} = [e^{ik_0 r} + g(\mathbf{r})] e^{-iEt/\hbar}. \quad (21.41b)$$

Если при $\mathbf{r} \rightarrow \infty$ потенциал стремится к нулю, как это обычно бывает, то E будет равна просто кинетической энергии частиц падающего пучка:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}.$$

Уравнение Шрёдингера будет иметь вид

$$H\psi = \left(\frac{p^2}{2m} + V \right) \psi = E\psi.$$

Замечаем, что $\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)e^{-ik_0 r} = 0$, тогда

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)g(r) = -V(r)[e^{ik_0 r} + g(r)] = -V(r)\psi(r). \quad (21.42)$$

Поскольку предполагается, что потенциальная энергия равна нулю при $r \rightarrow \infty$, то частица свободно движется при больших значениях r . Так как падающая волна уже представлена множителем $e^{ik_0 r}$, то функция $g(r)$ дает лишь расходящийся поток. Поэтому функция $g(r)$ должна асимптотически приближаться к выражению

$$g(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (21.43)$$

Это соответствует наиболее общей возможной форме расходящейся волны. Амплитуда является функцией θ и φ , что указывает на зависимость интенсивности рассеянной волны от угла рассеяния. Характер рассматриваемой волны показан на рис. 104.

Наиболее общее асимптотическое решение уравнения Шрёдингера при $r \rightarrow \infty$, когда $V(r) \rightarrow 0$, имеет вид

$$f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} + h(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr}}{r}.$$

Но последний член соответствует сходящейся волне. Хотя такая волна и возможна, практически она никогда не реализуется. Вместо этого мы имеем только падающую и расходящуюся волны, следовательно, $h(\theta, \varphi) = 0$.

Чтобы получить поперечник рассеяния, вычислим прежде всего падающий поток частиц. В падающем пучке плотность вероятности равна $P = |\psi_0|^2 = 1$ (так как $\psi_0 = e^{ik_0 r}$). Тогда падающий поток на единицу площади будет $Pv = \hbar k_0/m$. В рассеянном пучке плотность равна $|f(\theta, \varphi)|^2/r^2$, тогда расходящийся поток на единицу площади будет $\frac{\hbar k}{mr^2} |f(\theta, \varphi)|^2$. На сфере (которая предполагается очень большой по сравнению с размерами атома) элемент площади равен $r^2 d\Omega$, где $d\Omega$ — элемент телесного угла. Тогда поток в элементе телесного угла $d\Omega$ равен

$$j = \frac{\hbar k}{m} |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (21.44)$$

Однако по определению пп. 3 и 6 поперечное сечение $\sigma d\Omega$ численно равно вероятности того, что частица внутри пучка с сечением единичной площади отклонится в элемент телесного угла $d\Omega$. Поток отклоненных частиц равен $I \sigma d\Omega$, где I — падающий поток. Тогда поперечное сечение $\sigma d\Omega$ равно отношению потока отклоненных частиц к потоку падающих частиц. Из уравнения (21.44) получаем

$$\sigma d\Omega = \frac{|k|}{|k_0|} |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (21.45a)$$

Так как в настоящей задаче $|k| = |k_0|$, то выражение (21.45а) упрощается:

$$\sigma d\Omega = |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (21.45б)$$

25. Новая форма уравнения Шрёдингера. Таким образом, задача вычисления σ сводится к задаче определения интенсивности расходящейся волны, что требует, строго говоря, решения уравнения Шрёдингера. Однако мы хотим развить приближенные методы, а это удобнее всего сделать, заменяя дифференциальное уравнение Шрёдингера эквивалентным интегральным уравнением (см. также [28], гл. 7).

Для этого рассмотрим опять уравнение (21.42), которое можно записать в виде

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \right) g = V\psi.$$

Полагая $\frac{2m}{\hbar^2} V\psi = U(\mathbf{r})$, получаем

$$(\nabla^2 + k_0^2) g = U(\mathbf{r}). \quad (21.46)$$

Теперь наша цель заключается в том, чтобы выразить g как функцию от U . Для этого воспользуемся следующей теоремой:

$$(\nabla^2 + k_0^2) \left(\frac{e^{ik_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right) = 4\pi\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta(\mathbf{y}-\mathbf{y}')\delta(\mathbf{z}-\mathbf{z}'). \quad (21.47)$$

Для доказательства путем прямого дифференцирования найдем, что при $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$

$$(\nabla^2 + k_0^2) \frac{e^{ik_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \lambda(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = 0.$$

Задача 7. Проверить это уравнение.

Следовательно, λ удовлетворяет первому требованию к δ -функции, а именно что она равна нулю повсюду, за исключением точки $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. Для доказательства, что это δ -функция, достаточно показать, что интеграл вышеприведенной функции, который взят по произвольной области, окружающей начало координат, есть конечная постоянная величина, не зависящая от размеров и формы области (см. определение δ -функции, гл. 10, п. 15).

Так как $\lambda = 0$, когда $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$, то очевидно, что значение $\int \lambda(\mathbf{r}-\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$ одинаково для всех областей интегрирования, включающих точку $\mathbf{r}$. Следовательно, этот интеграл может быть вычислен, если найти его пределы при $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow 0$. Поэтому выберем за область интегрирования сферу радиуса $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = \epsilon$. Так как $\epsilon \rightarrow 0$, то можно легко показать, что $\int k_0^2 \frac{e^{ik_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \rightarrow 0$.

Задача 8. Доказать это утверждение.

Нам осталось лишь вычислить

$$\int \nabla^2 \left(\frac{e^{ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) d\mathbf{r}' = \int \operatorname{div} \left[\operatorname{grad} \left(\frac{e^{ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \right] d\mathbf{r}'.$$

С помощью теоремы Грина заменим этот объемный интеграл поверхностным:

$$\int \operatorname{grad} \left(\frac{e^{ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) d\mathbf{S} = \int \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \left(\frac{e^{ik_0 |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \right) d\mathbf{S}.$$

Заменяя $d\mathbf{S} = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 d\Omega$, где $d\Omega$ — элемент телесного угла, и интегрируя по $d\Omega$ (положив $|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| = \varepsilon$), мы окончательно получаем в пределе при $\varepsilon \rightarrow 0$ выражение

$$\int \lambda d\mathbf{r} = -4\pi.$$

Итак, мы доказали, что интеграл от λ есть конечная постоянная величина, не зависящая от области интегрирования, если последняя включает точку $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. Это дополняет доказательство того, что λ есть δ -функция *).

Применим теперь эту теорему к нашей задаче, построив функцию

$$g(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int U(\mathbf{r}') \frac{e^{ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \quad (21.48)$$

*) $\frac{e^{ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$ является частным случаем общего класса функций, которые в математике носят название *функций Грина*. Функциями Грина можно пользоваться для решения линейных дифференциальных уравнений вида $\alpha(D)\Psi = U(\mathbf{r})$, где $\alpha(D)$ — произвольная линейная функция дифференциальных операторов

$$\alpha(D) = A(\mathbf{r}) + B(\mathbf{r})D + C(\mathbf{r})D^2 + \dots$$

Функция Грина $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ обладает следующими свойствами:

а) $\alpha(D)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0$, если $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$, т. е. является решением однородного уравнения, получающегося, если положить $U = 0$, когда $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$.

б) $\alpha(D)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ имеет особую точку при $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$.

в) Приближение к бесконечности носит такой характер, что интеграл по элементу, содержащему начало координат, конечен. Следовательно, $\alpha(D)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ удовлетворяет всем требованиям δ -функции.

Общее решение уравнения

$$\alpha(D)\Psi = U(\mathbf{r})$$

может быть получено, если известно G . Решение имеет вид

$$\Psi = \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'.$$

Используя уравнение (21.47), мы видим, что $g(\mathbf{r})$ удовлетворяет уравнению (21.46). Единственным добавочным требованием, необходимым для доказательства того, что это является искомым решением, будет требование, чтобы функция $g(\mathbf{r})$ содержала только расходящиеся волны, т. е. чтобы при $r \rightarrow \infty$ эта функция принимала вид $f(\theta, \varphi) e^{ikr}/r$. Для доказательства этого заметим, что функция $U(\mathbf{r}')$ должна стремиться к нулю при $r' \rightarrow \infty$, так как $V(\mathbf{r}') \rightarrow 0$ и ψ остается конечной. Поэтому основной вклад в интеграл (21.48) дают ограниченные значения $\mathbf{r}'$. Когда $\mathbf{r}$ очень велико, то $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ можно разложить в ряд по степеням $|\mathbf{r}'|/|\mathbf{r}|$. Простое геометрическое рассмотрение показывает, что для больших r получаем

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cong r - \mathbf{r}' \cdot \mathbf{n},$$

где $\mathbf{n}$ — единичный вектор в направлении $\mathbf{r}$. Это приводит к следующему разложению:

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \cong \frac{e^{ik_0(r-\mathbf{r}'\cdot\mathbf{n})}}{r} \left(1 + \frac{\mathbf{r}\mathbf{n}'}{r} + \dots \right).$$

Таким образом, при $r \rightarrow \infty$ действительно получается расходящаяся волна; если выбрать $\frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$, то, наоборот, получилась бы сходящаяся волна.

Теперь мы можем окончательно получить уравнение Шрёдингера в новой форме. Полагая $U = \frac{2m}{\hbar^2} V\psi$, имеем

$$g(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \quad (21.49)$$

При $r \rightarrow \infty$ это выражение принимает вид

$$g(\mathbf{r}) \rightarrow -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (21.50)$$

Уравнение (21.50) можно упростить, если учесть, что вектор $\mathbf{k}'$, который направлен вдоль расходящейся волны, равен $k\mathbf{n}$. Тогда получаем

$$g(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (21.51a)$$

Мы можем также написать (см. уравнения (21.43) и (21.45b))

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (21.51b)$$

$$\sigma = |f(\theta, \varphi)|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right|^2. \quad (21.51b)$$

26. Обсуждение результатов п. 25. Уравнение (21.49) представляет собой интегральное уравнение, решение которого удовлетворяет уравнению Шрёдингера с правильными граничными условиями. Если написать $\psi = g(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}}$, то получаем

$$g(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int g(\mathbf{r}') \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' - \\ - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}'} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (21.52)$$

Это стандартное интегральное уравнение относительно функции $g(\mathbf{r})$. Его можно приближенно решить стандартными методами, которые будут рассмотрены в п. 27. Как мы увидим, оно имеет форму, делающую очень легким применение теории возмущений.

Можно получить простую физическую интерпретацию уравнения (21.49). Для этого заметим, что функцию $g(\mathbf{r})$ можно рассматривать как часть волновой функции, созданную рассеивающим потенциалом. Функция $g(\mathbf{r})$ имеет вид интеграла, содержащего функцию $e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$. Но это как раз и есть сферическая волна, расходящаяся из точки $\mathbf{r}'$ с длиной волны $\lambda = 2\pi/k$. Каждая сферическая волна входит с амплитудным множителем $V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')$. Другими словами, каждая точка вносит свой вклад, равный произведению потенциала в этой точке на волновую функцию $\psi(\mathbf{r}')$. Заметим, что $\psi(\mathbf{r}')$ — *полная* волновая функция, *включающая* в себя как рассеянную, так и падающую волну. Эта картина точно соответствует френелевской дифракции в оптике [27, 85*].

Асимптотическая форма волны (уравнение (21.51a)) показывает, что расходящаяся волна, движущаяся в направлении $\mathbf{n}$, представляет собой сумму ряда элементарных волн, возникающих в точках $\mathbf{r}'$.

Каждая точка вносит свою амплитуду $V(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')$, а фаза изменяется на множитель $e^{-ik(\mathbf{n}\mathbf{r}')}$. Эта картина в точности соответствует дифракции Фраунгофера в оптике [27, 85*], т. е. дифракционным полосам на бесконечности. Для иллюстрации этого на рис. 108

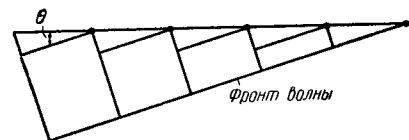


Рис. 108.

показано, как вычисляются дифракционные полосы решетки. При этом берут волну, которая пропорциональна амплитуде, существующей на решетке, и складывают доли от каждой части, беря их с фазой

$$e^{-ik\mathbf{n}\mathbf{r}'} = e^{-ikx \sin \theta},$$

где $\mathbf{n}$ — направление наблюдения, x — координата, измеренная вдоль направления решетки, а θ — угол, показанный на рис. 108. Уравнения (21.50) и (21.51a) можно рассматривать как точную формули-

ровку принципа Гюйгенса для электронных волн (см. гл. 6, п. 3, а также [25], § 7).

27. Борновское приближение. Приближение Борна применимо всегда, когда потенциал V достаточно мал. Причина этого такая же, как и в методе последовательных приближений. Если V достаточно мал, члены в правой части уравнения (21.52), содержащие gV , будут второго порядка малости, потому что сама g уже первого порядка. Это равнозначно замене функции ψ падающей волной $e^{ik_0 r}$; такой прием законен, если рассеянная волна мала по сравнению с падающей волной. Таким образом, мы пренебрегаем вторичным рассеянием рассеянной волны. Если это приближение подставить в уравнение (21.52), то получаем

$$g \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(r') e^{ik_0 r'} \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} dr' \quad (21.53)$$

и для $r'/r \ll 1$

$$f(\theta, \varphi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(k_0 - k)r'} V(r') dr', \quad (21.54)$$

$$\sigma(\theta, \varphi) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \int e^{i(k_0 - k)r'} V(r') dr' \right|^2. \quad (21.55)$$

Последнее выражение для поперечного сечения точно совпадает с тем, которое было получено в теории, рассматривающей рассеяние как процесс квантового перехода (см. уравнение (21.33а)).

Борновское приближение обычно используется в оптике, но, как правило, на это явно не указывается. Например, при вычислении дифракции от щели предполагается, что амплитуда волны в щели равна амплитуде только падающей волны. Однако при строгом решении необходимо также учесть и амплитуду дифрагированной волны в щели при вычислении полной интенсивности по схеме Гюйгенса. Так как дифрагированная волна в свою очередь дает свой вклад в дифракционную картину, то можно видеть, насколько сложна эта задача. Она может быть строго решена только при точном решении волнового уравнения, в котором принято во внимание изменение амплитуды волны в щели в результате электрических токов, индуцируемых в щели полной волной, *включающей* и ту часть, которая создается самими токами. Для щели, широкой по сравнению с длиной волны, амплитуда волны внутри щели не очень сильно отличается от амплитуды падающей волны, поэтому при вычислении дифракционных полос можно пользоваться приближением Борна. Для узкой щели изменение волны щелью настолько велико, что требуется значительно более точное решение волнового уравнения.

28. Связь между описанием процессов рассеяния в координатном и импульсном представлениях. Трактровка процессов рассеяния в координатном представлении, которую мы сейчас развивали,

является своего рода дополнительной к трактовке в импульсном представлении. В координатном представлении определяется вероятность рассеяния в некоторую область углов путем нахождения доли от всех элементарных волн, рассеянных от различных точек области, которая занята рассеивающим потенциалом. В этом методе легко видеть, почему так важна форма потенциала, поскольку интерференция от различных частей потенциала будет определять полную картину рассеяния. Легко также видеть, почему медленные частицы не могут очень эффективно прощупать форму потенциала (см. уравнение (21.53)), так как при слишком большой длине волны фаза ее изменяется настолько мало по всей области потенциала, что вряд ли имеет значение вообще, как именно распределен в этой области потенциал. Этот метод не достаточен лишь в том смысле, что с его помощью нельзя получить ясной картины: почему то, что рассеивается, проявляет себя как локализованная частица, а не как рассеянная волна *) (см. п. 17)? Импульсное представление трактует процесс рассеяния как квантовый переход из состояния с одним значением импульса в состояние с другим. Оно не дает возможности детально проанализировать, как происходит этот переход. Весь процесс рассматривается целиком как единый акт, который *не следует* разлагать на более мелкие процессы. В этом смысле описание является неполным **). Однако оно дает хорошее представление о том, как частицы отклоняются в некотором определенном направлении.

В различных условиях один из методов может оказаться более подходящим, чем другой. Поэтому мы будем пользоваться тем из них, который нам удобнее. Заметим, что оба метода всегда приводят к одним и тем же конечным результатам, так как они попросту являются двумя различными способами решения одного и того же уравнения Шрёдингера. Поэтому выбор этих способов определяется лишь удобством одного по сравнению с другим.

29. Связь между методом стационарных состояний и временным описанием процессов рассеяния. Вспомним, что, как указывалось в п. 17, применение стационарной падающей плоской волны не соответствует фактическим граничным условиям. Наоборот, в действительности существует волновой пакет, который падает на рассеи-

*) Это, конечно, является примером двойственной корпускулярно-волновой природы вещества, разбиравшейся детальнее в гл. 6 и 8. Когда электрон рассеивается от потенциала, который существует в области с размерами, малыми по сравнению с длиной волны, то проявляются волновые потенциальные свойства электрона; но если он взаимодействует с устройством, измеряющим его положение, то проявляются его корпускулярные потенциальные свойства.

**) Говорить о неполноте этого описания можно только с точки зрения старых классических представлений, трактующих микрочастицы как твердые шарики. — *Прим. ред.*

вающий потенциал при $t \rightarrow -\infty$. После того, как пакет сталкивается с потенциалом, появляется рассеянный пакет, который удаляется от рассеивающего центра, когда $t \rightarrow +\infty$.

Для образования пакета надо умножить функцию стационарного состояния на соответствующий множитель $e^{-ikh^2t/2m}$, зависящий от времени, и проинтегрировать по малому интервалу импульсов k_z *) с весовым коэффициентом $f(k_z - k_{0z})$. Используя асимптотическую форму волновой функции, даваемую выражениями (21.41a) и (21.43), мы получаем для зависящей от времени волновой функции при больших радиусах

$$\psi(x, t) = \int f(k_z - k_{0z}) dk_z \left(e^{ik_{0z}z} + \frac{f(\theta, \varphi) e^{ikr}}{r} \right) e^{-\frac{ikh^2t}{2m}}. \quad (21.56)$$

Первый член в правой части дает падающую волну. Центр этого пакета находится в экстремуме фазы или там, где $z = \hbar k_0 t / m = p_0 t / m$. Пакет представляет движение электрона в направлении оси z , которое начинается с больших отрицательных значений z при $t \rightarrow -\infty$, проходит через рассеивающий потенциал вблизи момента $t = 0$ и переходит к положительным значениям z при $t \rightarrow +\infty$.

Рассеянная волна дается вторым членом в правой части уравнения (21.56). Вводя фазу комплексной амплитуды этой волны по формуле $f(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)| e^{i\alpha}$, мы получаем для центра пакета

$$r = \frac{\hbar k t}{m} - \frac{\partial \alpha}{\partial k}.$$

Так как по определению существенны лишь положительные значения t , то ясно, что для больших отрицательных значений t рассеянного пакета не существует, а для больших положительных значений t появляется такой пакет, выходящий из начала координат. Член $\partial \alpha / \partial k$ представляет собой отставание (или опережение) по времени, обусловленное действием потенциала (ср. с гл. 11, п. 19).

Если пакет велик по сравнению с областью рассеивающего потенциала, то точные размеры пакета не будут оказывать сколько-нибудь решающего влияния на величину поперечного сечения. Это обусловлено тем, что интервал волновых чисел в пакете будет тогда мал по сравнению с соответствующим интервалом в разложении потенциала. Поэтому неопределенность в импульсе, связанная с конечной шириной пакета, приводит к отклонениям, которые исчезающе малы по сравнению с отклонениями, обусловленными самим рассеивающим потенциалом. Этим самым оправдывается использование бесконечно протяженной плоской волны для вычисления поперечного сечения.

Выясним теперь вопрос, почему поперечные сечения, которые рассчитаны с помощью теории возмущений, зависящей от времени

*) Образуют также пакеты и в направлении осей x и y , но они обычно настолько широки в этих направлениях, что распылением вдоль них можно пренебречь по сравнению с распылением в направлении z .

(см. п. 20), в импульсном представлении будут те же самые, как и рассчитанные с помощью волновых пакетов, построенных из собственных функций гамильтониана. Напомним, что в теории возмущений, зависящей от времени, делалось предположение, что при $t=0$ потенциал включается внезапно, а также, что волновая функция имеет вид плоской волны $e^{ik_0 z}$. Такие граничные условия, конечно, не очень точно отражают действительное положение вещей. Однако при выводе уравнения (21.31) было сделано предположение о столь длительном возмущении, что функция $\frac{\sin^2 [(E - E_{p_0}) t / 2\hbar]}{(E_p - E_{p_0})^2}$, появляю-

щаяся в уравнении (21.30a), по существу становится эквивалентной δ -функции. Таким образом процесс рассеяния длится столь продолжительное время, что влиянием «краевых» эффектов, обусловленных внезапным включением потенциала при $t=0$, можно пренебречь. Поэтому, хотя принятые граничные условия и не точны, но они практически приводят к правильным результатам. Интересно, что замена волнового пакета бесконечно протяженной плоской волной в методе стационарного состояния оправдывается теми же соображениями, а именно такой шириной волнового пакета, что эффектами «краев» тоже можно пренебречь.

30. Другое применение борновского приближения: рассеяние от кристаллической решетки. Интересно применить приближение Борна к расчету рассеяния от кристаллической решетки. В решетке атомы размещены в пространстве упорядоченно, что характеризуется заданием радиусов-векторов узлов решетки в таком виде:

$$\mathbf{r}_j = l_j \mathbf{a} + m_j \mathbf{b} + n_j \mathbf{c},$$

где l_j, m_j, n_j — целые числа, а $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ — три основных единичных вектора решетки. Если, например, эти три вектора равны по абсолютной величине и ортогональны, то мы имеем простую кубическую решетку.

Полный электростатический потенциал, создаваемый всеми атомами решетки, равен сумме потенциалов $V_j = V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ каждого отдельного атома. Потенциал V_j в первом приближении можно считать сферически симметричным относительно центра атома $\mathbf{r} = \mathbf{r}_j$. Приближенно этот потенциал можно представить в виде экранированного кулоновского потенциала (см. рис. 99). Однако при более точном рассмотрении потенциал несколько отклоняется от сферической симметрии (особенно на больших расстояниях) и имеет симметрию кристалла. Полный потенциал равен

$$V = \sum_j V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j).$$

Функция V является периодической в том смысле, что она не изменится, если $\mathbf{r}$ сместить на любой вектор решетки $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ или $\mathbf{c}$.

Определим теперь вероятность рассеяния электрона этим потенциалом. Для амплитуды рассеянной волны получаем

$$\begin{aligned} f(\theta, \varphi) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\mathbf{r}'} \sum_j V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) d\mathbf{r}' = \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_j e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\mathbf{r}_j} \int V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j)} d\mathbf{r}'. \end{aligned}$$

Заметим, что в этом уравнении интеграл не зависит от индекса суммирования j , поэтому его можно обозначить через $g(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$, и он точно равен коэффициенту Фурье потенциала *любого* из атомов. Итак, будем иметь

$$f(\theta, \varphi) = g(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \sum_j e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\mathbf{r}_j}. \quad (21.57)$$

Записав $\mathbf{r}_j = l_j\mathbf{a} + m_j\mathbf{b} + n_j\mathbf{c}$, мы видим, что сумма в уравнении (21.57) равна нулю, за исключением тех случаев, когда выполняются условия

$$(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \mathbf{a} = 2\pi\alpha,$$

$$(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \mathbf{b} = 2\pi\beta,$$

$$(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \mathbf{c} = 2\pi\gamma,$$

где α , β и γ — целые числа. А это есть не что иное, как хорошо известные интерференционные условия Брэгга — Вульфа для отражения от кристаллов ([11], стр. 486—495; [71*]).

Совершенная периодичность потенциала V предполагает, что кристалл имеет бесконечные размеры. Ясно, что реальные кристаллы имеют лишь конечное число атомов, хотя это число и может быть очень большим. Если сумма (21.57) берется по конечному числу значений j , то мы получаем функцию с острыми максимумами вблизи брэгговских углов. Ширина максимумов обратно пропорциональна размеру кристалла. Эта задача очень похожа на задачу о разрешающей способности конечной дифракционной решетки в оптике.

Функция $|g(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2$ называется «атомным структурным фактором». Она определяет интенсивность отражения электронов в любом направлении, разрешенном интерференционными условиями. Ясно, что для получения больших изменений импульса нужно иметь атомы, потенциалы которых резко изменяются как функции координат, в противном случае отсутствуют соответствующие коэффициенты Фурье.

Дифракция электронов — мощное средство исследования структуры кристалла. Его можно также использовать для определения «атомного структурного фактора» и тем самым для получения сведений о характере распределения потенциала внутри атома. Наконец,

дифракция электронов может быть использована для изучения структуры молекул.

Задача 9. Предполагая, что потенциал, создаваемый атомом, равен $e^{-r/r_0}/r$, вычислить дифракционные полосы, которые следует ожидать при рассеянии от двухатомной молекулы с межатомным расстоянием, равным a . Приняв $r_0 = 10^{-8}$ см и $a = 3 \cdot 10^{-8}$ см, оценить минимальную энергию электрона, необходимую для того, чтобы четко обнаружить разделение двух атомов в молекуле.

Указание. Необходимо провести усреднение по всем возможным ориентациям оси молекулы.

31. Условия применимости борновского приближения. Приближение Борна предполагает замену в уравнении (21.50) полной волновой функции ψ на волновую функцию падающей волны $e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}}$. Поэтому оно будет справедливо, когда интенсивность рассеянной волны $g(\mathbf{r})$ мала по сравнению с $e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}}$ в области, где велик потенциал $V(\mathbf{r})$. В большинстве случаев и $V(\mathbf{r})$, и $g(\mathbf{r})$ принимают наибольшие значения вблизи начала координат, поэтому грубым критерием применимости приближения Борна будет выполнение неравенства

$$|g(\mathbf{r})|^2 \ll 1$$

для малых значений r . Однако иногда может случиться, что $|g(\mathbf{r})|$ — небольшая величина для малых r , но большая для промежуточных значений r , где потенциал $V(\mathbf{r})$ имеет еще заметную величину. Поэтому этим критерием следует пользоваться с осторожностью. Однако может случиться и так, что приближение Борна все еще приводит к правильным результатам, когда указанный критерий уже не выполняется. Малость $|g(\mathbf{r})|$ по всей области дает достаточное, но не необходимое условие для применимости приближения.

С помощью уравнения (21.53) этот критерий принимает вид

$$|g(0)|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \int V(\mathbf{r}') \frac{e^{i(\mathbf{k}_0 \mathbf{r}' + \mathbf{k} \mathbf{r}')} }{r'} d\mathbf{r}' \right|^2 \ll 1. \quad (21.58a)$$

(Достаточно вычислить $|g(\mathbf{r})|$ при $r=0$, так как обычно волновая функция наибольшая в начале координат.)

Если потенциал обладает сферической симметрией, то (21.58a) можно проинтегрировать по θ (выбирая ось z в направлении $\mathbf{k}_0$), что дает

$$4\pi^2 \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2 k} \right)^2 \left| \int_0^\infty V(r') e^{ikr'} (e^{ik_0 r'} - e^{-ik_0 r'}) dr' \right|^2 \ll 1.$$

Полагая $k = k_0$, получаем

$$\left(\frac{m}{\hbar^2 k} \right)^2 \left| \int_0^\infty V(r') (e^{2ikr'} - 1) dr' \right|^2 \ll 1. \quad (21.586)$$

32. Применение к случаю экранированного кулоновского рассеяния. Проверим применимость борновского приближения к случаю экранированного кулоновского потенциала

$$V = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} e^{-ar},$$

где $a = 1/r_0$. Мы должны вычислить интеграл

$$I = \int_0^{\infty} e^{-ar'} (e^{2ikr'} - 1) \frac{dr'}{r'}.$$

Чтобы вычислить интеграл I , продифференцируем его сначала по a :

$$\frac{\partial I}{\partial a} = \int_0^{\infty} -r' e^{-ar'} (e^{2ikr'} - 1) \frac{dr'}{r'} = \frac{1}{a} - \frac{1}{a - 2ik},$$

а затем проинтегрируем по a , что дает

$$I = \ln(a) - \ln(a - 2ik) + C,$$

где C — постоянная интегрирования. Можно показать, что при $a = \infty$ $I = 0$. Следовательно, мы должны выбрать $C = 0$. В итоге получаем

$$I = -\ln\left(1 - \frac{2ik}{a}\right) = -\ln(1 - 2ikr_0).$$

Введем фазу комплексного выражения, стоящего под знаком логарифма:

$$(1 - 2ikr_0) = \sqrt{1 + 4k^2 r_0^2} e^{i\varphi}, \text{ где } \varphi = -\operatorname{arctg} 2kr_0.$$

Тогда

$$I = -\ln \sqrt{1 + 4k^2 r_0^2} - i\varphi = -\ln \sqrt{1 + 4k^2 r_0^2} + i \operatorname{arctg} 2kr_0$$

и условие применимости борновского приближения принимает вид

$$\left(\frac{m}{\hbar^2 k}\right)^2 (Z_1 Z_2 e^2)^2 [(\ln \sqrt{1 + 4k^2 r_0^2})^2 + (\operatorname{arctg} 2kr_0)^2] \ll 1.$$

Делая замену $\hbar k/m = v$, где v — скорость частицы на бесконечности, получаем

$$\left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v}\right)^2 [(\ln \sqrt{1 + 4k^2 r_0^2})^2 + (\operatorname{arctg} 2kr_0)^2] \ll 1.$$

Множители в квадратных скобках обычно не бывают очень большими. Действительно, $\operatorname{arctg} 2kr_0$ ограничен значением $\pi/2$, а логарифм

растет с ростом r_0 очень медленно; для большинства задач он немногим больше единицы. Таким образом, главное требование для применимости приближения Борна гласит, что

$$\left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} \right) \ll 1. \quad (21.59)$$

Этот критерий практически не зависит от радиуса экранирования, если не считать очень слабой зависимости из-за множителя $\ln \sqrt{1 + 4k^2 r_0^2}$, который фактически входит в уравнение (21.59).

Выясним, насколько хорошо выполняется этот критерий. Для типичного случая электронов с энергией в 10 кэв имеем $v = 6 \cdot 10^9$ см/сек. Предположим, что мы выбираем $Z = 10$, тогда $(Z_1 Z_2 e^2 / \hbar v) \cong 0,4$. Приближение Борна лишь с трудом удовлетворяется в этом случае. Однако если выбрать $Z = 1$, то борновское приближение удовлетворяется довольно хорошо. Таким образом, чтобы удовлетворить борновскому приближению, требуется иметь падающие частицы с большой скоростью и рассеивающие частицы с малым атомным номером. Однако мы увидим, что в частном случае кулоновского рассеяния имеются специальные причины, вследствие которых приближение Борна дает хорошее приближение, приводящее к правильным результатам, даже если этот критерий не выполняется.

33. Другой критерий применимости борновского приближения. Если вспомнить, что изменение потенциала действует подобно изменению показателя преломления в оптике, то можно вывести еще другой критерий применимости борновского приближения. Внутри области существования потенциала волновой вектор приближенно дается выражением $k = \sqrt{2m(E - V)}/\hbar$. Тогда фаза волны на границе атома будет отличаться от фазы, которая была бы в отсутствие потенциала, на величину

$$\Delta\varphi = \int_0^\infty \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} (V\sqrt{E - V} - V\sqrt{E}) dr. \quad (21.60)$$

Если эта разница мала по сравнению с единицей, то она может служить индикатором того, что волновая функция не очень отличается от своего значения, которое было бы в отсутствие потенциала.

Если $V/E \ll 1$, то этот критерий может быть упрощен путем разложения квадратного корня. Тогда

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^\infty \sqrt{\frac{m}{2E}} V dr \ll 1.$$

Обозначая через $\bar{V}$ средний потенциал и через $\bar{r}$ средний радиус действия потенциала, получим

$$\frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}} \bar{V} \bar{r} \ll 1.$$

Для прямоугольной потенциальной ямы радиуса a и глубины $V_0 \ll E$ получаем для критерия применимости борновского приближения

$$E \gg \frac{m}{2} \left(\frac{V_0 a}{\hbar} \right)^2.$$

34. Связь условия применимости классического приближения с условием нарушения критерия применимости борновского приближения. С точки зрения представлений, трактующих рассеяние как переход от одного состояния в импульсном представлении к другому, непригодность борновского приближения означает, как уже говорилось, что следует перейти к более высокому приближению, в котором система может совершать много последовательных переходов. Другими словами, тот же самый атом совершает рассеяние и повторное рассеяние, причем число повторных рассеяний зависит от степени непригодности борновского приближения. Но это как раз есть условие, приводящее к возможности классического описания процесса рассеяния. Другими словами, в условиях полной непригодности борновского приближения, когда отклонение частицы заданным рассеивателем обусловлено столь многими последовательными квантовыми процессами, можно надеяться на возможность классического описания всего процесса как непрерывного. Мы уже получили критерий применимости классического приближения (21.216), который показывает, что в общем случае классическое приближение действительно предполагает наличие большого потенциала (а следовательно, и силы), поэтому если критерий применимости борновского приближения достаточно нарушен, то, вообще говоря, имеются основания пользоваться классическим приближением.

Однако следует с осторожностью пользоваться классической теорией, когда борновское приближение уже непригодно, так как при выводе критерия (21.216) импульс, передаваемый частице, вычислялся в предположении, что частица не отклоняется на очень большой угол. При больших отклонениях эту величину надо вычислять с помощью более точного метода. Однако в большинстве случаев приближенное вычисление, пригодное для малых отклонений, приводит к правильным результатам по порядку величины даже и при больших отклонениях.

35. Сравнение классического и борновского приближений для случая кулоновского потенциала. В этой задаче удобно исходить из критерия (21.216), который является условием применимости

классической теории. Подстановка $F = Z_1 Z_2 e^2 / r^2$ приводит к

$$\frac{4Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} \gg 1. \quad (21.61)$$

Сравнение этого выражения с уравнением (21.59) показывает, что в случае кулоновского рассеяния классическая теория становится применима как раз тогда, когда борновское приближение уже совсем непригодно.

36. Специфические свойства кулоновского потенциала. Кулоновский потенциал обладает тем специфическим свойством, что расчет в классическом приближении (критерий (21.61)), и расчет в борновском приближении (критерий (21.59)) дают одно и то же поперечное сечение рассеяния. Более того, как мы увидим в п. 59, точный квантовомеханический расчет поперечного сечения приводит к такому же резерфордскому выражению для поперечного сечения даже в промежуточной области, где неприменимы ни классическое, ни борновское приближения. Этот результат не получается ни для какого другого потенциала; действительно, как мы увидим, даже экранированный кулоновский потенциал приводит к различию между классическим и квантовым рассеянием для той области углов, где существенно экранирование.

Это необычное свойство приводит к важному результату, что при рассеянии электронов атомами борновское приближение часто дает удивительно хорошие результаты, несмотря на то, что не выполняется ни один из общих критериев его применимости. Это обусловлено следующими причинами. Около границы атома сила далека от кулоновской, но она мала, так как большая часть заряда ядра экранируется электронами. Поэтому здесь борновское приближение применимо просто из-за малости V . Внутри атома потенциал V настолько велик, что можно ожидать полной непригодности борновского приближения, но здесь отсутствует экранирование и потенциал кулоновский, поэтому случайно точный результат близок к тому, который дает приближение Борна. Следовательно, во всем атоме борновское приближение дает сравнительно хороший результат, который, однако, не может быть объяснен общими положениями.

37. Неприменимость борновского приближения при рассеянии на ядрах. То, что борновское приближение оказалось столь подходящим, весьма плодотворно отразилось на развитии атомной теории, так как в противном случае разработка теории строения атома надолго затормозилась бы просто вследствие математических трудностей. Однако можно легко показать, что при рассеянии на ядрах борновское приближение непригодно, за исключением случая очень высоких энергий рассеиваемых частиц ($\cong 100$ Мэв или выше). Чтобы показать это, воспользуемся прямоугольной ямой, моделирующей потенциал ядерных сил, как это рассматривалось в гл. 11, п. 3. Можно пред-

ставить потенциал между нейтроном и протоном в виде ямы с радиусом $a = 2.8 \cdot 10^{-3}$ см и глубиной $V_0 \cong 20$ Мэв. Согласно уравнению (21.58б), борновское приближение пригодно, если

$$\left(\frac{m}{k\hbar^2} \right)^2 \left| \int_0^a V_0 (e^{2ikr} - 1) dr \right|^2 = \left(\frac{m}{k\hbar^2} \right)^2 V_0^2 \left| \frac{e^{2ika}}{2k} - a \right|^2 \ll 1.$$

Весьма грубо можно положить, что борновское приближение вступает в силу, когда это выражение равно $1/2$. При рассеянии нейтронов на протонах пользуются приведенной массой $\mu = m/2$, где $m = 1.6 \cdot 10^{-24}$ г. Простое вычисление показывает, что приближение становится законным, когда относительная энергия будет порядка 50 Мэв или энергия бомбардировки будет 100 Мэв и выше (см. гл. 15, п. 5). Так как большинство ядерных экспериментов производится при более низких энергиях, то мы будем пользоваться более точными методами, чтобы получить правильное представление о ядерном рассеянии. К сожалению, получается так, что когда борновское приближение уже непригодно для ядер, то еще нельзя считать законной классическую трактовку, поэтому приходится иметь дело со сложной промежуточной областью, привлекая для этого более точные методы, которые будут описаны в п. 39.

Задача 10. Проверить полученные результаты с помощью критерия, выведенного из малости фазового смещения (уравнение (21.60)).

38. Применение к случаю экранированного кулоновского потенциала. Мы видели, что для неэкранированного кулоновского потенциала поперечное сечение рассеяния остается тем же самым, независимо от того, законно или нет борновское приближение. Однако мы сейчас покажем, что для экранированного кулоновского потенциала минимальный угол, ниже которого резерфордская формула для рассеяния оказывается несправедливой, получается различным в зависимости от применимости того или другого приближения. Если можно пользоваться борновским приближением, то этот угол находим из уравнения (21.36б):

$$(\theta_0)_{\text{борн}} \cong \sin \theta_0 \cong \frac{\hbar}{pr_0}. \quad (21.62a)$$

Если справедлива классическая теория, то угол, согласно уравнению (21.11), равен

$$(\theta_0)_{\text{класс}} \cong \frac{Z_1 Z_2 e^2}{Er_0}. \quad (21.62b)$$

Отношение этих двух значений угла равно

$$\frac{(\theta_0)_{\text{класс}}}{(\theta_0)_{\text{борн}}} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E\hbar} p = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{v\hbar}. \quad (21.62b)$$

Если $(Z_1 Z_2 e^2 / v \hbar) \gg 1$, т. е. применимо классическое приближение, то получаемый классический результат значительно больше результата, даваемого борновским приближением. Если $(Z_1 Z_2 e^2 / v \hbar) \ll 1$, т. е. применимо борновское приближение, то классический результат будет меньший из двух. Следовательно, в общем случае истинный минимальный угол всегда равен *большому* из двух возможных значений.

Это правило, что всегда надо брать большее из двух значений минимального угла, может быть объяснено следующим образом. Во всех случаях сам по себе процесс рассеяния, конечно, будет квантовомеханическим. Классическая теория применима, только если передача импульса происходит путем многократных последовательных квантовых процессов. В каждом элементарном квантовомеханическом процессе передачи импульса минимальный угол, для которого еще может быть применена резерфордовская формула, определяется следующим образом. Если частица должна вообще рассеяться, то она должна проникнуть в область действия потенциала, имеющую радиус порядка r_0 . Но пока частица находится в этой области, она не может иметь вполне определенный импульс просто потому, что, как мы видели в гл. 8, сама структура локализованной частицы требует более или менее однородного распределения ее возможных импульсов по области порядка по крайней мере $\Delta p \cong \hbar / 2r_0$. Этот интервал импульсов соответствует интервалу углов рассеяния порядка $\theta_0 \cong \Delta p / p \cong \hbar / 2r_0 p$, т. е. такому же, какой получается из уравнения (21.62a). Так как углы должны быть распределены более или менее однородно по этому интервалу, то невозможно ожидать существования острого максимума в распределении, как предсказывается в случае незранированного кулоновского рассеяния.

Это означает, что если предсказанный классически минимальный угол для резерфордовского рассеяния будет меньше чем $\hbar / 2pr_0$, то классическая теория несправедлива, так как в ее выводах пренебрегают эффектами соотношения неопределенностей. Таким образом, минимальный угол никогда не может быть меньше чем $\hbar / 2pr_0$.

Это рассмотрение объясняет квантовомеханическое минимальное отклонение. Явление может также быть понято на основе картины дифракции электронных волн, так как хорошо известно, что волна, дифрагирующая на области размером порядка r_0 , будет иметь дифракционные полосы с минимальной угловой шириной порядка $\lambda / r_0 \cong \hbar / 2pr_0$.

Задача 11. Доказать это утверждение.

Когда борновское приближение перестает быть справедливым, частица получает много последовательных отклонений, каждое из которых по крайней мере так же велико, как упомянутый выше минимум. Следовательно, там, где законно классическое приближение, результирующее отклонение будет всегда больше, чем пред-

сказываемое по борновскому приближению. Это объясняет правило, что классическим результатом следует пользоваться, только когда минимальное отклонение, предсказываемое классически, будет больше, чем отклонение, даваемое борновским приближением, а квантовый результат надо брать, если классический результат меньше.

39. Метод парциальных волн (Рэлей, Факсен и Хольтсмарк).

Когда борновское приближение перестает быть законным, необходимо воспользоваться более точным методом для решения задачи рассеяния. Одним из таких методов, применимым к сферически симметричному потенциалу, является разложение волновой функции в ряд по шаровым функциям, умноженным на радиальные волновые функции. Таким методом мы пользовались уже, например, в задаче об атоме водорода. Этот метод первоначально применил Рэлей (см. [57], стр. 323) для рассеяния звуковых волн, а позже Факсен и Хольтсмарк (см. [28], гл. 2) для рассеяния волн Шрёдингера.

Мы начнем с замечания, что волновая функция обладает цилиндрической симметрией относительно оси вдоль направления падающей волны, которую мы примем за направление оси z . Тогда волновую функцию можно разложить в ряд по так называемым полиномам Лежандра. Заметим, что нет нужды вводить соответствующие функции Лежандра, так как ψ обладает цилиндрической симметрией и потому не является функцией φ . Таким образом, аналогично результату гл. 15, п. 1 получаем

$$\psi = \sum_l f_l(r) P_l(\cos \theta). \quad (21.63)$$

Каждый член этого разложения называется «парциальной волной», соответствующей отдельному значению l . Функции $f_l(r)$ удовлетворяют дифференциальным уравнениям (15.26). Удобно ввести функцию

$$g_l = r f_l(r).$$

Тогда волновое уравнение примет вид (15.3)

$$-\frac{d^2 g_l}{dr^2} + \left\{ \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] \right\} g_l = 0. \quad (21.64)$$

Для решения задачи рассеяния нужно прежде всего решить написанный выше ряд уравнений при граничных условиях (см. гл. 15, п. 3)

$$g_l \rightarrow r^{l+1} \quad \text{при} \quad r \rightarrow 0.$$

40. Общий характер решений. Мы всегда предполагаем, что $V(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Поэтому при больших r волновые функции асимптотически приближаются к тем функциям, которые получатся, если пренебречь членами $V(r)$ и $l(l+1)/r^2$ в уравнении (21.64). Так как в процессе рассеяния E — всегда положительная величина, то

волновые функции принимают следующую асимптотическую форму:

$$g_l \cong A_l \sin(kr + \Delta_l), \quad (21.65)$$

где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, A_l и Δ_l — постоянные, которые следует определить из решений дифференциального уравнения.

Что дает фаза Δ_l , мы можем увидеть, рассмотрев общий характер решений методами, развитыми в связи с решением задачи об атоме

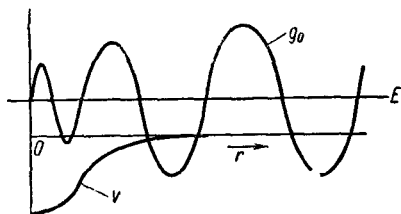


Рис. 109.

водорода (гл. 15, п. 12). Например, для s -волн решение начинается с $g_0 \sim r$ (рис. 109). Тогда, так как потенциал вблизи начала координат большой, волновая функция там очень быстро искривляется, и длина волны будет малая. По мере роста r потенциал падает, и, в конце концов, длина волны становится равной величине, соответствующей свободной частице. Однако фаза волны зависит от совокупного влияния потенциала на кривизну волновой функции при малых радиусах. Поэтому Δ_0 в общем случае будет зависеть от $V(r)$ и от энергии падающей частицы E .

Если $l \neq 0$, то общий характер процесса, определяющего величину Δ_l , будет весьма напоминать процесс при $l=0$. Но функция $g_l(r)$ начинает изменяться, как r^{l+1} , и не искривляется вниз до тех пор, пока «эффективная кинетическая

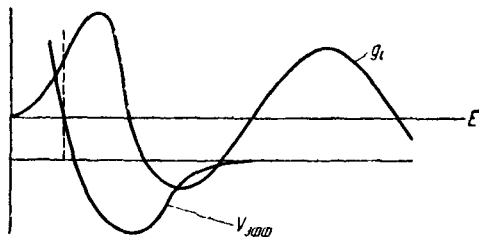


Рис. 110.

энергия» $\left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right]$ положительна. Волновая функция имеет вид, изображенный на рис. 110.

41. Частный случай кулоновского потенциала. Предположение, что $\Delta l \rightarrow \text{const}$ при $r \rightarrow \infty$, требует не только, чтобы $V(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, но также, чтобы $V(r) \rightarrow 0$ быстрее, чем $1/r$. Для доказательства воспользуемся приближением ВКБ, ограничиваясь случаем s -волн и замечая, что те же результаты справедливы для всех значений l . Волновая функция в приближении ВКБ равна (см. (15.14a))

$$g \cong \frac{\sin \left\{ \int_0^r \sqrt{2m[E - V(r)]} \frac{dr}{\hbar} \right\}}{p^{1/2}}.$$

Хотя это может и не быть хорошим приближением при малых r , но оно всегда будет хорошим приближением при больших r именно вследствие того, что V там очень мало, поэтому также мало относительное изменение длины волны, осуществляющееся на расстоянии самой длины волны. Итак, при больших r можно произвести разложение

$$\sqrt{E-V} \cong \sqrt{E} - \frac{V}{2\sqrt{E}}.$$

Следовательно,

$$g \sim p^{-1/2} \sin \left[\int_a^r \sqrt{2mE} \frac{dr}{\hbar} - \int_a^r \sqrt{\frac{m}{2E}} V \frac{dr}{\hbar} + \int_0^a \sqrt{2m(E-V)} \frac{dr}{\hbar} \right],$$

где a — произвольный радиус, больше которого это разложение применимо.

Если положить $V = Ze/r$, то получаем (с $\sqrt{2mE}/\hbar = k$)

$$g \sim p^{-1/2} \sin \left[k(r-a) + \int_0^a \sqrt{2m(E-V)} \frac{dr}{\hbar} - Ze \sqrt{\frac{m}{2E}} \ln \frac{r}{a} \right].$$

Мы видим, что при $r \rightarrow \infty$ фаза не приближается к постоянной величине, а изменяется, как $\ln r$. Если бы мы выбрали $V = Ze^2/r^{1+n}$, где $n > 0$, то мы получили бы постоянную фазу при $r \rightarrow \infty$. Следовательно, предположение, что g приближается к форме, определяемой выражением (21.65), будет удовлетворяться, только если $V(r)$ убывает с ростом r быстрее, чем это происходит с кулоновским потенциалом. Поскольку это свойство, как будет показано, весьма существенно для применимости метода парциальных волн, то разбору случая кулоновского потенциала будет уделено особое внимание (см. п. 58). Здесь же мы пока ограничимся рассмотрением потенциала, который убывает с расстоянием быстрее, чем $1/r$.

42. Парциальные волны для свободной частицы. Для иллюстрации метода и получения некоторых результатов, могущих быть полезными в дальнейшем, рассмотрим здесь задачу свободной частицы методом парциальных волн. Дифференциальное уравнение (21.64) дает

$$\frac{d^2 g_l}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} g_l = -k^2 g_l. \quad (21.66)$$

Наиболее общим решением будет [58]

$$g_l = A \sqrt{kr} J_{l+1/2}(kr) + B \sqrt{kr} J_{-l-1/2}(kr). \quad (21.67)$$

Так как функция $J_{l+1/2}(kr)$ изменяется при малых r , как $(kr)^{-(l+1/2)}$, то она не является пригодным решением, следовательно, мы должны положить $B = 0$.

Известно, что для бесселевых функций полуцелого порядка можно найти выражения, содержащие конечное число тригонометрических функций, например:

$$\left. \begin{aligned} g_0 &= A \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin kr, \\ g_1 &= A \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\cos kr - \frac{\sin kr}{kr} \right). \end{aligned} \right\} \quad (21.68)$$

Читатель легко проверит, что (21.68) являются решениями дифференциального уравнения (21.66). Для бесселевых функций более высоких порядков этого же типа выражения несколько громоздки, но могут быть легко получены [58].

43. Асимптотическая форма функций Бесселя. Хорошо известна математическая теорема [58], что для больших x

$$J_n(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi}{4} - n \frac{\pi}{2}\right). \quad (21.69)$$

Следовательно, в нашем случае получаем

$$\begin{aligned} g_l \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos\left[kr - \frac{\pi}{4} - \left(l + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{2}\right] = \\ = A \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), \end{aligned} \quad (21.70)$$

откуда

$$\Delta_l = -\frac{l\pi}{2}. \quad (21.71)$$

44. Интерпретация парциальных волн.

Случай А: $l = 0$ (s -волны).

Мы видим из уравнений (21.68), что волновая функция равна

$$\psi_0 = \frac{g_0}{r} \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin kr}{r} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r} \right). \quad (21.72)$$

Эта волновая функция сферическая. Она равна сумме сходящейся и расходящейся волн, каждая из которых распространяется в радиальном направлении. Волновая функция соответствует условию, по которому волны должны сходиться в начале координат (e^{-ikr}/r), после чего они расходятся (e^{ikr}/r). Для получения сохранения вероятности требуются две волны: сходящаяся и расходящаяся. Кроме того, чтобы избежать бесконечного значения ψ в начале координат, нужно вычесть сходящуюся волну из расходящейся, т. е. как раз то,

что и делается выше. (Сумма сходящейся и расходящейся волн дала бы $\psi = \infty$ при $r = 0$.)

Случай Б: $l = 1$ (p -волны).

Полная волновая функция имеет вид

$$\psi \sim P_1(\cos \theta) \frac{g_1(r)}{r} \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\cos kr}{r} - \frac{\sin kr}{kr^2} \right) \cos \theta. \quad (21.73)$$

Легко видеть, что при малых r величина $|\psi|$ пропорциональна r и достигает максимума где-то вблизи $kr \cong 1$, после чего начинает падать. Поэтому невероятно, чтобы частица подошла к началу координат намного ближе, чем

$$r_0 \cong \frac{1}{k} = \frac{\lambda}{2\pi}.$$

Это можно объяснить следующим образом: почти невероятно, чтобы частицы с единичным угловым моментом могли подойти ближе к началу координат, чем на расстояние r_0 , при котором их момент количества движения, измеренный классически $pr_0 = \hbar kr_0$, был бы порядка $\hbar$. Можно показать, что для больших моментов количества движения соответственно минимальное расстояние, на котором $|\psi|^2$ велико, определяется выражением $pr_0 \cong \hbar l$.

Эти результаты могут несколько измениться в присутствии сильного потенциала притяжения. Тогда минимальное расстояние получается путем вычисления импульса из полной кинетической энергии $p^2 = 2m(E - V)$. Следовательно, критерий для минимального вероятного радиуса будет

$$\sqrt{2m[E - V(r)]} r_0 \cong \hbar l. \quad (21.74)$$

Если потенциал V большой и отрицательный, то частица может подойти довольно близко к началу координат, несмотря на отталкивающее влияние «центробежного потенциала».

Полная волновая функция для $l = 1$, конечно, пропорциональна $\cos \theta$. Асимптотически эти волны как раз равны сумме сходящейся и расходящейся компонент (см. выражение (21.73)), но вблизи начала координат положение сложнее, так как волны не точно направлены к началу координат, как s -волна, а, наоборот, стремятся обойти это начало вследствие наличия момента количества движения.

45. Граничные условия для парциальных волн в случае свободной частицы. До сих пор мы изучали по отдельности различные парциальные волны, представляющие возможные волновые функции для свободной частицы. Все эти волны соответствуют тому положению, когда волны должны более или менее приближаться к началу координат, после чего они опять расходятся. Ни одна из них не соответствует обычным граничным условиям на бесконечности

для свободной частицы, а именно существованию падающей плоской волны.

Так как плоская волна является решением уравнения Шрёдингера для свободной частицы и так как каждая парциальная волна тоже есть решение этого уравнения, то, следовательно, возможно разложение плоской волны в ряд парциальных волн, потому что, согласно теореме разложения, из таких рядов можно получить произвольное решение. Следовательно, мы имеем право написать

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_l C_l \frac{g_l(r)}{r} P_l(\cos \theta). \quad (21.75)$$

Мы можем решить это уравнение относительно коэффициентов разложения $g_n(r)$, умножая (21.75) на функции $P_n(\cos \theta)$ и интегрируя по всем углам θ . Производя замену $\cos \theta = x$ и используя нормировку и ортогональность функций $P_l(x)$, получаем

$$\frac{C_n g_n(r)}{r} = \frac{2n+1}{2} \int_{-1}^1 e^{ikrx} P_n(x) dx.$$

Можно математически показать, что полученное выражение действительно есть правильная функция Бесселя, которая дает нам точное решение для $g_n(r)$. Действительно, получаем [58]

$$\int_{-1}^1 e^{ikrx} P_n(x) dx = \frac{\sqrt{2\pi} i^n}{\sqrt{kr}} J_{n+1/2}(kr). \quad (21.76a)$$

Сравнение с уравнением (21.67) показывает, что это правильная функция и что

$$C_n = \frac{i^n (2n+1)}{k}.$$

Поэтому разложение плоской волны по полиномам Лежандра принимает вид

$$\begin{aligned} e^{ikr \cos \theta} &= \frac{1}{k} \sum_l \frac{g_l(kr)}{r} (i)^l (2l+1) P_l(\cos \theta) = \\ &= \frac{1}{k} \sum_l \frac{g_l(kr)}{r} (i)^l (2l+1) P_l(\cos \theta). \end{aligned} \quad (21.76b)$$

Это означает, что для описания плоской волны мы должны составить сумму сферических волн. Такая плоская волна содержит все возможные моменты количества движения. Ясно, что эти моменты количества движения необходимы, например, в классическом пределе.

Если пучок частиц направлен на атом, то присутствуют все возможные моменты количества движения, потому что момент количества движения равен pr_0 , где r_0 — параметр столкновения, который принимает все возможные значения. Однако в квантовой теории возможные моменты количества движения квантуются и каждый связан с волновой функцией с допустимой угловой зависимостью $P_l(\cos \theta)$.

46. Учет граничных условий в присутствии потенциала. Для учета граничных условий в присутствии потенциала заметим сначала, что, согласно уравнениям (21.70) и (21.76б), асимптотическое разложение для плоской волны имеет вид

$$e^{ikr \cos \theta} \sim \sum_l \frac{(i)^l}{kr} (2l+1) P_l(\cos \theta) \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right).$$

Написав $(i)^l = \exp(\pi i l/2)$, получаем

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_l \frac{(2l+1)}{2ikr} P_l(\cos \theta) (e^{ikr} - e^{il\pi} e^{-ikr}). \quad (21.77)$$

В присутствии потенциала, согласно уравнению (21.65), асимптотическая форма волновой функции имеет вид

$$r\psi = \sum_l P_l(\cos \theta) g_l(r) \sim \sum_l A_l P_l(\cos \theta) \sin(kr + \Delta_l).$$

Здесь удобно положить

$$\Delta_l = \delta_l - \frac{l\pi}{2}, \quad A_l = e^{il\pi/2} (2l+1) \frac{e^{i\delta_l} B_l}{k}.$$

Тогда получаем

$$\psi = \sum_l \frac{B_l (2l+1)}{2ikr} (e^{ikr+2i\delta_l} - e^{il\pi} e^{-ikr}) P_l(\cos \theta). \quad (21.78)$$

Теперь удобнее всего определить коэффициенты B_l , построив волновой пакет. Ясно, что, раньше чем волновой пакет достигнет области, где замечен потенциал, форма его должна быть такая же, как у плоской волны, и что изменение его формы может произойти только после того, как волна действительно «столкнулась» с потенциалом. Это означает, что сходящаяся часть действительного волнового пакета должна быть тождественна сходящейся части пакета плоских волн. Чтобы удовлетворить этим граничным условиям, надо выбрать $B_l = 1$. Для доказательства правильности этого выбора умножим ψ на $e^{-i\hbar k^2 t/2m}$ и проинтегрируем по малой области k . Тогда центр пакета будет находиться в той точке, где фаза волновой

функции экстремальна. Если выбрать $B_l = 1$, то центр сходящегося пакета получается из уравнения

$$\frac{\partial \varphi_l}{\partial k} = \frac{\partial}{\partial k} \left(-kr - \frac{\hbar k^2}{2m} t + l\pi \right) = 0,$$

или

$$r = -\frac{\hbar k t}{m} = -vt.$$

Таким образом, для больших отрицательных времен мы получаем сходящийся пакет. Так как мы имеем дело только с положительными значениями r , то при $t=0$ сходящийся пакет исчезает, после чего его заменяет расходящийся пакет. Центр расходящегося пакета, соответствующий l -й волне, находится из условия

$$\frac{\partial \varphi'_l}{\partial k} = 0, \quad \text{где} \quad \varphi'_l = kr - \frac{\hbar k^2}{2m} t + 2\delta_l,$$

т. е. из условия

$$r = vt - 2 \frac{\partial \delta_l}{\partial k}.$$

Следовательно, расходящийся пакет появляется с запаздыванием (или опережением) по времени на $2 \frac{\partial \delta_l}{\partial k}$, вызванным действием потенциала (см., например, п. 29 и гл. 11, п. 19).

Из всего сказанного мы заключаем, что падающий пакет идентичен с падающей частью пакета плоских волн, а расходящийся пакет изменяется под действием потенциала.

47. Формула для поперечного сечения рассеяния. Для определения интенсивности рассеянной волны заметим, что даже в отсутствие потенциала все еще должна существовать расходящаяся волна, которая как раз совпадает с расходящейся частью плоской волны. Исследование рассеянных волн сводится к определению изменений, претерпеваемых расходящимся пакетом. Поэтому мы получаем асимптотическую формулу рассеянной волны, вычитая из истинной расходящейся волны расходящуюся волну, которая была бы в отсутствие потенциала. Согласно уравнениям (21.77) и (21.78), эта разность равна

$$F_{\text{рас}} = \sum_r \frac{e^{ikr}}{r} \frac{(e^{2i\delta} - 1) P_l(\cos \theta) (2l+1)}{2ik} = \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta), \quad (21.79)$$

где $F_{\text{рас}}$ — асимптотическая форма рассеянной волны. Полная асимптотическая волновая функция будет тогда равна

$$e^{ikz} + \frac{f(\theta) e^{ikr}}{r}.$$

Сравнивая это выражение с уравнением (21.45a), мы видим, что поперечное сечение равно

$$\sigma = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_l \frac{(2l+1)}{2} P_l(\cos \theta) (e^{2i\delta_l} - 1) \right|^2 \quad (21.80)$$

Эта формула дает угловую зависимость поперечного сечения при известном δ_l (последний должен быть получен из решения уравнения Шрёдингера). Эта угловая зависимость частично обусловлена интерференцией волн с различными значениями l . Например, предположим, что мы имеем рассеянные волны только с $l=0$. Тогда угловая зависимость отсутствует, т. е. поперечное сечение обладает сферической симметрией. Если имеем только $l=1$, то поперечное сечение пропорционально $\cos^2 \theta$. Если же присутствует и $l=0$, и $l=1$, как в функции $f(\theta) = a + b \cos \theta$, то

$$\sigma = |a|^2 + |b|^2 \cos^2 \theta + (ab^* + ba^*) \cos \theta.$$

Несколько типичных кривых показано на рис. 111. Таким образом, угловая зависимость поперечного сечения включает интерференционные члены между различными l -волнами. Если включить большие значения моментов количества движения, то вид поперечного рассеяния σ может стать еще более сложным. В классическом пределе ($l \rightarrow \infty$) можно образовать пакет волн с различными l таким образом, что они дадут максимум при определенном значении θ . Это соответствует

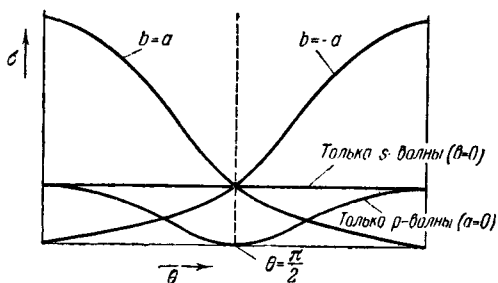


Рис. 111.

классической орбите, на которую частицы попадают при определенном параметре столкновения и рассеиваются под определенным углом.

48. Интегральное поперечное сечение. Для нахождения полного поперечного сечения проинтегрируем σ по всем телесным углам, используя ортогональность $P_l(\cos \theta)$ и условия нормировки (уравнение (14.52б)). Для полного поперечного сечения получаем

$$S = \sum_l \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (21.81a)$$

Этот результат означает, что в полном поперечном сечении различные парциальные волны не интерферируют. Они интерферируют только при определении угловой зависимости,

Максимальное поперечное сечение, соответствующее данному значению l , равно

$$(S_l)_{\max} = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2}. \quad (21.816)$$

Это значение осуществляется при $\delta_l = \pi/2$. Производя замену $k = 2\pi/\lambda$, получаем

$$(S_l)_{\max} = \frac{(2l+1)\lambda^2}{\pi}. \quad (21.81в)$$

Например, для s -волны максимальное поперечное сечение соответствует окружности радиуса λ/π , а для больших значений l — еще большему радиусу. Это поперечное сечение может быть создано рассеивающим центром, гораздо меньшим чем λ , если условия таковы, что $\delta_l = \pi/2$.

49. Вычисление фазы для непроницаемой сферы. Для непроницаемой сферы радиуса a мы должны иметь $\psi = 0$ на ее поверхности. Для s -волн дифференциальное уравнение вне сферы будет иметь вид $-\frac{d^2g}{dr^2} = k^2g$. Его решение равно

$$g_0 = A \sin(kr + \delta).$$

Чтобы $g = 0$ при $r = a$, должно быть $\delta_0 = -ka$. Тогда парциальное поперечное сечение рассеяния для s -волн будет

$$S = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 ka. \quad (21.82a)$$

Для больших значений моментов количества движения решения будут иметь вид

$$g = \sqrt{kr} [AJ_{l+1/2}(kr) + BJ_{l-1/2}(kr)].$$

(Заметим, что так как начало координат теперь исключено, то функции $J_{-l-1/2}(kr)$ должны сохраняться.) Граничные условия при $r = a$ дают

$$g(a) = 0 \quad \text{или} \quad \frac{B_l}{A_l} = -\frac{J_{l+1/2}(ka)}{J_{l-1/2}(ka)}.$$

Фаза может быть вычислена из асимптотической формы волновой функции (см. выражение (21.70)). Для больших r

$$\begin{aligned} g &\sim A \cos\left[kr - \left(l + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right] + B \cos\left[kr + \left(l + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right] = \\ &= A \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) + (-1)^l B \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) = \sqrt{A^2 + B^2} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right), \end{aligned}$$

где

$$\operatorname{tg} \delta_l = (-1)^l \frac{B_l}{A_l}.$$

Частный случай $ka \ll 1$. Если длина волны настолько велика, что $ka \ll 1$, то легко видеть, что значения δ_l для последовательно возрастающих l быстро становятся очень малы. Это происходит потому, что частицы с данным моментом количества движения l будут сильно рассеиваться только в том случае, если они достигают области, занятой потенциалом, или если только $pa \gg \hbar l$ или $ka \gg l$ (см. п. 44). Это можно также показать непосредственно, вычисляя δ_l из полученной выше формулы.

Задача 12. Используя ряды для разложения функций Бесселя [58], вычислить $\text{tg } \delta_l$ для малых ka и показать, что

$$\frac{\delta_l}{\delta_0} \ll 1, \quad \frac{\delta_l + 1}{\delta_l} \ll 1.$$

Таким образом, для малых ka поперечное сечение почти полностью обусловлено s -волнами. Следовательно, можно пользоваться уравнением (21.82а). Разлагая $\sin^2 ka$ в ряд, получаем из этого уравнения

$$S \cong 4\pi a^2. \quad (21.826)$$

Заметим, что этот результат в четыре раза больше классического результата для твердой сферы (уравнение (21.3)) *). Такое увеличение вызвано квантовомеханическими дифракционными эффектами.

Интересно проследить переход от квантового к классическому рассеянию, так как при таком переходе поперечное сечение должно скачком изменить свое значение от $4\pi a^2$ до πa^2 . Квантовое рассеяние осуществляется при $ka \ll 1$, т. е. когда $\lambda \gg 2\pi a$. Если же длина волны становится меньше размеров сферы, то прежде всего это ска-

зывается на том, что приходится считаться с волнами с большими моментами количества движения, поэтому поперечное сечение становится зависящим от угла. Однако если дальше укорачивать длину волны и приближаться к классической области, то поперечное сечение опять

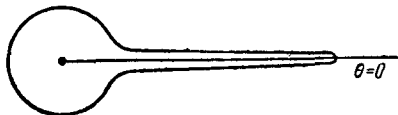


Рис. 112.

становится сферически симметричным, но оно будет уже равно только πa^2 , за исключением области вблизи $\theta = 0$ с угловой шириной порядка $\Delta\theta \cong \lambda/2\pi a$. Полярное распределение интенсивности показано для случая больших λ на рис. 112. Большая проекция, выступающая вперед, в основном обусловлена дифракционными эффектами, содержащими полное поперечное сечение, равное πa^2 .

*) В уравнении (21.3) a по определению равно только половине расстояния между центрами сфер, а в (21.826) эта же величина равна полному расстоянию между центрами. (Мы здесь рассматриваем только одинаковые частицы.)

Следовательно, для очень коротких длин волн полное поперечное сечение равно $2\pi a^2$, в противоположность величине $4\pi a^2$, полученной для очень больших длин волн. Однако в классическом пределе длина волны становится настолько короткой, что большая проекция для рассеяния вперед соответствует слишком малым отклонениям, чтобы приводить к заметным результатам. Следовательно, для всех практических целей эффективное классическое поперечное сечение равно только πa^2 .

Задача 13. Для сферы радиуса 1 см и электронов с энергией 1 эв вычислить ширину дифракционных полос в направлении вперед и показать, что она слишком мала для того, чтобы представлять практический интерес. (Надо пользоваться принципом Гюйгенса, как в оптике).

50. Применение точного метода к задаче рассеяния от прямоугольной ямы для случая s -волн. Рассмотрим прямоугольную яму радиуса a и глубины V_0 , как показано на рис. 113. Предположим, что частицы падают с энергией E . Мы хотим вычислить поперечное сечение, ограничиваясь рассмотрением только s -волн. Это ограничение справедливо только при условии, что $ka \ll 1$. Внутри ямы радиальное уравнение имеет вид

$$-\frac{d^2 g}{dr^2} = k_1^2 g, \quad (21.83a)$$

где

$$k_1^2 = (E - V_0) \frac{2m}{\hbar^2}.$$

Рис. 113.

Так как функция $g(r)$ должна исчезать в начале координат (см. гл. 15, п. 3), то наиболее общее допустимое решение будет равно

$$g = A \sin k_1 r, \quad (21.83б)$$

где A — произвольная постоянная. Вне ямы наиболее общее решение будет

$$g = B \sin(kr + \delta_0), \quad (21.83в)$$

где

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E.$$

B и δ должны быть получены из требования, чтобы $g(r)$ и $g'(r)$ были непрерывны при $r = a$. Однако для нахождения только фазы δ достаточно, чтобы непрерывным было лишь отношение g'/g . Полагая

$$\frac{g'}{g} = \alpha, \quad (21.84a)$$

получаем

$$k \operatorname{ctg}(ka + \delta_0) = \alpha, \quad (21.84б)$$

где

$$\alpha = k_1 \operatorname{ctg} k_1 a,$$

или

$$\operatorname{tg}(ka + \delta_0) = \frac{\operatorname{tg} ka + \operatorname{tg} \delta_0}{1 - \operatorname{tg} ka \operatorname{tg} \delta_0} = \alpha. \quad (21.84\text{в})$$

Решая это уравнение относительно $\operatorname{tg} \delta_0$, получаем

$$\operatorname{tg} \delta_0 = \frac{\frac{k}{a} - \operatorname{tg} ka}{1 + \frac{k}{a} \operatorname{tg} ka} = \frac{k \left(\frac{1}{a} - \frac{\operatorname{tg} ka}{k} \right)}{1 + \frac{k}{a} \operatorname{tg} ka}. \quad (21.84\text{г})$$

Полное поперечное сечение равно (см. уравнение (21.81а))

$$S = \frac{4\pi \sin^2 \delta_0}{k^2} = \frac{4\pi}{k^2 (1 + \operatorname{ctg}^2 \delta_0)} = \frac{4\pi}{k^2 + \frac{(\alpha + k \operatorname{tg} ka)^2}{\left(1 - \alpha \frac{\operatorname{tg} ka}{k}\right)^2}}. \quad (21.85)$$

Вычисляя α из уравнения (21.84б), получаем поперечное сечение.

51. Эффект Рамзауера. Из уравнения (21.85) мы видим, что если фаза рассеяния равна некоторому целому числу, умноженному на π , то для $k \neq 0$ поперечное сечение равно нулю. Если δ — целое число, умноженное на π , то $\operatorname{tg} \delta_0 = 0$. Для прямоугольной ямы мы получаем условие для $\operatorname{tg} \delta_0 = 0$ из уравнения (21.84г):

$$\frac{1}{a} = \frac{\operatorname{tg} ka}{k}. \quad (21.86)$$

Получив α из уравнения (21.84б), находим

$$\frac{\operatorname{tg} k_1 a}{k_1} = \frac{\operatorname{tg} ka}{k}.$$

Для малых k $ka \ll 1$. При замене $\operatorname{tg} ka$ на ka получаем

$$\operatorname{tg}(k_1 a) \cong k_1 a.$$

Для малых k значение k_1 приближенно определяется выражением $\sqrt{2mV_0}/\hbar$. Если V_0 и a таковы, что уравнение (21.86) удовлетворяется точно, то поперечное сечение рассеяния будет равно нулю, а если оно удовлетворяется приближенно, то поперечное сечение рассеяния будет очень мало. Такое исчезновение поперечного сечения рассеяния для ненулевого потенциала специфично для волновых свойств вещества. Оно могло бы осуществиться, например, при рассеянии световых волн на маленьких прозрачных сферах с большим показателем преломления, выбранным таким образом, чтобы величина $\sin \delta_0$, соответствующая рассеянной волне, была равна нулю. Это означает

по существу, что эффекты от различных частей потенциала на рассеянную волну (см. п. 26) в процессе интерференции гасят друг друга, оставляя только нерассеянную волну. Хотя этот результат был получен для частного случая прямоугольной потенциальной ямы, его можно легко обобщить и на потенциальную яму любой формы, которая обладает тем свойством, что она достаточно резко локализована в пространстве. Такой вывод может быть сделан потому, что исчезновение фазы определяется совокупностью фазовых сдвигов, претерпеваемых волной во всей потенциальной яме, так что всегда возможно получить сдвиг фаз, равный $l\pi$, при соответствующем выборе величины и радиуса действия потенциала.

Для медленных электронов, рассеянных от атомов инертных газов, $\sin \delta_0$ оказывается очень малой величиной, и поперечное сечение рассеяния электрона на атоме поэтому значительно меньше, чем поперечное сечение для обычных газокинетических расчетов. Этот эффект называется эффектом Рамзауера. По мере роста энергии электрона фаза рассеянной волны изменяется, и постепенно, при энергиях более высоких чем 25 эв, появляется обычное кинетическое поперечное сечение рассеяния газа.

Эффект Рамзауера несколько напоминает резонанс прозрачности, который был рассмотрен в случае одномерного потенциала (см. гл. 11, п.9). Однако эта аналогия неполна, потому что условие для эффекта Рамзауера (уравнение (21.86)) неточно совпадает с условием для резонансной прозрачности в случае одномерной потенциальной ямы (уравнение (11.50)). Причина этого отличия заключается в том, что в одномерном случае мы определяем прошедшую волну как полную волну, проходящую через яму. В задаче рассеяния мы имеем падающую волну, сходящуюся к яме. Часть ее входит в яму, а часть отражается от ее краев. Результирующий эффект приводит к расходящейся волне, фаза которой зависит от того, что происходит с волной в яме. Вопрос о том, какая часть этой расходящейся волны соответствует рассеянной волне, решается в зависимости от величины сдвига фазы, который претерпела эта волна по сравнению с расходящейся волной, имевшейся в отсутствие потенциала. Поэтому мы видим, что интенсивность рассеянной волны зависит от таких свойств потенциала, которые несколько отличаются от его свойств, определяющих интенсивность той части волны, которая проходит через потенциал и выходит опять с другой стороны. Исчезновение поперечного сечения рассеяния в эффекте Рамзауера, как мы уже видели, происходит в результате действий различных частей потенциала, складывающихся таким образом, что создается волна, которую нельзя отличить от волны, совсем не попадающей в область действия потенциала.

52. Приближение для случая малых k . При малых k мы можем разложить выражение для $\lg \delta_0$, ограничиваясь только членами

вплоть до третьего порядка малости (k^3). Это дает

$$\operatorname{tg} \delta_0 \cong k \left[\frac{\left(\frac{1}{a} - a\right) - \frac{k^2 a^3}{3}}{1 + k^2 \frac{a}{a}} \right]. \quad (21.87a)$$

Мы видим, что при $k \rightarrow 0$ фаза также приближается к нулю. Знак фазы при малых k зависит от знака $\frac{1}{a} - a$.

Если величина k настолько мала, что $k^2 a^2 \ll 1$ и $k^2 a/a \ll 1$, то написанная выше формула упрощается и принимает вид

$$\operatorname{tg} \delta_0 \cong k \left(\frac{1}{a} - a \right). \quad (21.87b)$$

Поперечное сечение в этом приближении равно

$$S \cong \frac{4\pi}{k^2 + \frac{a^2}{(1 - aa)^2}} = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right) \frac{1}{E + \frac{\hbar^2 a^2}{2m} \frac{1}{(1 - aa)^2}}. \quad (21.88)$$

Чтобы получить ясное представление о поперечном сечении рассеяния при малых энергиях, нужно только подставить величину a , определив ее из уравнения (21.84б).

53. Применение для случая ядерного рассеяния. Рассмотрим теперь несколько применений для случая ядерного рассеяния. Однако, прежде чем приступить к этому, отметим, что до сих пор мы имеем весьма мало сведений относительно природы ядерных сил. Основная цель изучения в данной книге такой задачи заключается в том, чтобы проиллюстрировать, как можно воспользоваться квантовой теорией для попытки получения новых результатов в той области, где сами основы теории еще довольно неясны. Таким путем мы надеемся показать, что применимость теории не ограничивается простым расчетом разного рода численных результатов на основе известной и определенной теории.

Как было установлено в гл. 11, п. 3, существуют доказательства, указывающие, что потенциальную энергию нейтрона в поле протона можно представить в виде потенциальной ямы с глубиной порядка 20 Мэв и радиусом действия порядка $2,8 \cdot 10^{-13} \text{ см}$. Эта яма, безусловно, не точно прямоугольная, но многие ее главные черты можно грубо аппроксимировать с помощью прямоугольной ямы.

Однако можно получить много важных результатов и не делая никаких специальных предположений о форме потенциальной ямы, кроме того, что вне некоторого радиуса действия, порядка $3 \cdot 10^{-13} \text{ см}$, потенциал настолько мал, что им можно пренебречь. По этой причине удобно разделить задачу решения уравнения Шрёдингера на две части, а именно на решение внутри и вне ямы. Так как вне ямы нет заметного потенциала, то решение будет такое же, как и для

свободной частицы (см. уравнение (21.83в)). Внутри ямы общая задача решения волнового уравнения сложнее, но из результатов этого решения нас будет, в основном, интересовать условие, что $g=0$ при $r=0$, а также нужно определить отношение $g'/g=\alpha$ в точке $r=a$. Поэтому все что следует сделать — это потребовать непрерывности отношения функций g'/g в точке a путем соответствующего выбора фазы δ .

Для s -волн путь решения точно такой же, какой был использован и при выводе уравнения (21.84а), поскольку справедливы те же уравнения. Однако добавляется условие, что α интерпретируется как отношение $(g'/g)_{r=a}$, полученное в результате решения уравнения Шрёдингера с истинным потенциалом, если только такое решение существует.

54. Приближенная зависимость поперечного сечения рассеяния от энергии связи дейтрона при малых значениях энергии. Хотя мы и не можем непосредственно получить решения для α , поскольку мы детально не знаем формы потенциала, но несмотря на это можно получить богатую информацию относительно α , если сравнить наблюдаемые поперечные сечения с вычисленными как функции α . Здесь мы будем пользоваться приближенным значением α , полученным в результате опыта, согласно которому связанное состояние дейтрона обладает энергией $E=-2,23$ Мэв. Значение α для связанного состояния легко вычислить из тех соображений, что вне действия потенциала волновая функция затухает экспоненциально для s -волн: $g=A \exp(-\sqrt{2mB}r/\hbar)$, где B — энергия связи. Тогда для значения α_0 в связанном состоянии получаем

$$\alpha_0 = -\frac{\sqrt{2mB}}{\hbar}.$$

Мы видим, что для связанного состояния α_0 должна быть отрицательной величиной. Это обусловлено тем, что волновая функция внутри потенциальной ямы проходит через максимум и уменьшается с расстоянием таким образом, чтобы сомкнуться с ветвью, затухающей экспоненциально при $r=a$.

Потенциал имеет глубину порядка 20 Мэв. Следовательно, α_0 испытывает лишь незначительное изменение, когда E возрастает от $-2,23$ Мэв до нуля или несколько выше, просто потому, что длина волны в любой определенной точке сильно не изменяется при таком малом относительном возрастании кинетической энергии. Например, для прямоугольной потенциальной ямы $\alpha_0=k_1 \operatorname{ctg} k_1 a$ изменяется примерно на 20%, когда E возрастает от $-2,16$ Мэв до нуля *).

*) Поэтому весь этот расчет сводится к эмпирическому подбору α_0 для небольших отрицательных значений энергии, затем мы пользуемся этим приближенным значением α_0 для небольших положительных значений энергии.

Подставляя в качестве α_0 его значение для связанного состояния, мы находим для поперечного сечения из уравнения (21.88)

$$S \cong \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right) \frac{1}{E + \frac{B}{(1 - \alpha_0 a)^2}}. \quad (21.89)$$

Подставляя фактическую массу протона и энергию в лабораторной системе отсчета, которая равна удвоенной относительной энергии, получаем

$$S = \frac{4\pi\hbar^2}{m_L} \frac{1}{\frac{E_L}{2} + \frac{B}{(1 - \alpha_0 a)^2}}, \quad (21.90)$$

где E_L — энергия в лабораторной системе, а m_L — истинная масса протона.

Задача 14. Вычислить поперечное сечение для $E=0$ (ответ должен быть порядка $3 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2$).

Поперечное сечение, рассчитанное по уравнению (21.90), имеет максимум при $E=0$ и после этого более или менее плавно убывает. Это приближение довольно хорошее (примерно до 25%) вплоть до энергий $E \cong 5 \text{ Мэв}$. При больших энергиях надо пользоваться более точными формулами. Кроме того, начинают вступать в игру p -волны, и это оказывает влияние и на полное поперечное сечение, и на угловую зависимость.

55. Учет спиновых сил. В предыдущем пункте мы получили общее приближенное выражение для поперечного сечения рассеяния при столкновении типа нейтрон — протон с низкой энергией. В этом выражении поперечное сечение представляется как функция энергии связи только дейтрона и не зависит от деталей формы потенциальной функции. Поэтому сравнение с экспериментом должно дать хорошую проверку применимости наших основных представлений о ядерных силах. Опыт показывает, что поперечное сечение для низкого значения энергии будет порядка $20 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2$, а наш расчет дает порядок величины только $3 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2$.

Это расхождение было объяснено Вигнером, который обнаружил, что для получения большего поперечного сечения при нулевой энергии надо, согласно уравнению (21.88), иметь потенциальную яму, для которой значение α было бы намного ниже, чем то, что дает энергия связи дейтрона. Чтобы получить такое низкое значение α , нужно иметь яму мельче, чем яма, дающая правильную энергию связи дейтрона. Это должно привести к меньшей кривизне волновой функции внутри области действия потенциала, а потому она достигла бы

точно $r=a$ с меньшим наклоном. Сравнение свойств потенциальной ямы достаточно глубокой, чтобы объяснить энергию связи дейтрона, и ямы, объясняющей рассеяние с меньшим значением α , показано на рис. 114.

Чтобы примирить различие в глубине потенциалов, требуемое данными по рассеянию и величиной энергии связи дейтрона, Вигнер предположил, что ядерные силы зависят от спина, причем когда спины частиц параллельны, то яма глубже, чем когда они антипараллельны. Из независимых источников известно [26], что в дейтроне

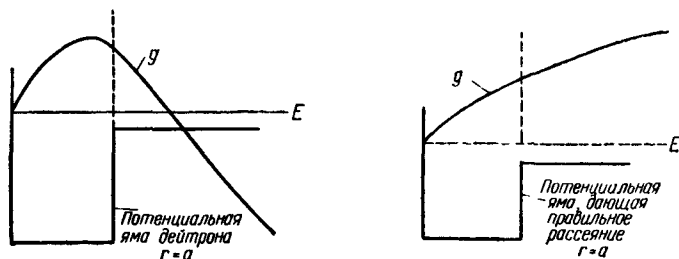


Рис. 114.

спины нейтрона и протона параллельны. С другой стороны, например, ориентации спинов в пучке падающих нейтронов по отношению к спину любого протона в мишени распределены хаотически, так что осуществляются обе возможности. Это означает, что большое поперечное сечение рассеяния получается в случаях антипараллельной ориентации, а параллельная ориентация имеет достаточно глубокую потенциальную яму, объясняющую энергию связи дейтрона.

В пучке, в котором спины нейтронов ориентированы хаотически, они в среднем будут параллельны спином произвольных протонов для $3/4$ падающих частиц и антипараллельны для $1/4$ из них. Такой результат следует из изучения свойств спиновых переменных, которое показывает, что имеется втрое больше способов осуществить параллельную ориентацию спинов, чем антипараллельную (см., например, гл. 17, п. 10). Это означает, что полное поперечное сечение рассеяния равно

$$S = \frac{3}{4} S_{\parallel} + \frac{1}{4} S_{\perp},$$

где $S_{\parallel}$ и $S_{\perp}$ — соответственно поперечные сечения для параллельных и антипараллельных спинов.

Полагая S равным наблюдаемой величине $21 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2$ и

$$S_{\parallel} = 3 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2.$$

получаем

$$S_a \cong 75 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2.$$

Это действительно довольно большое поперечное сечение. Площадь поперечного сечения потенциальной ямы равна только около $0,3 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2$. Возможность существования такого большого поперечного сечения целиком обусловлена волновыми свойствами вещества и связана, как мы увидим ниже, с существованием вблизи значения энергии $E=0$ резонанса вследствие малого наклона волновой функции при $r=a$. Для прямоугольной потенциальной ямы условия резонанса требуют, чтобы наклон волновой функции равнялся нулю при $r=a$ (см. уравнение (11.50)).

56. Определение глубины потенциальной ямы. Можно получить согласие с экспериментальными данными для поперечного сечения рассеяния при низких энергиях, если выбрать величину α^2 для синглетной (антипараллельной) ямы, равной $1/50$ от соответствующей величины для триплетной (параллельной) ямы (см. уравнение (21.90)). Здесь можно указать на две возможности:

1) Может существовать действительное связанное состояние, весьма близкое к $E=0$. Энергия связи тогда была бы $B \cong 2,23/50 \text{ Мэв} \cong \cong 40 \text{ кэв}$.

2) Может существовать виртуальный уровень (см. гл. 11, п. 20 и гл. 12, п. 14) при $E \cong 40 \text{ кэв}$. Это должно соответствовать положительному значению α при $E=0$, но для $E \cong 50 \text{ кэв}$ кривизна волновой функции должна уже достаточно возрасти, чтобы величина $\alpha = g'/g$ имела нулевое значение при $r=a$, соответствующее виртуальному уровню.

Невозможно сделать выбор между этими двумя возможностями на основании одного лишь нейтронно-протонного рассеяния. Заметим, однако, что, согласно уравнению (21.876), для положительного α фаза при малых k положительна, в то время как для отрицательных α она отрицательна. Поэтому можно получить сведения относительно знаков фаз двух рассеянных волн, учитывая интерференцию. Для этого надо рассмотреть рассеяние нейтронов сначала на молекулах водорода, у которых спины двух протонов параллельны (ортоводород), и затем на молекулах, у которых спины антипараллельны (параводород). Если нейтроны с длиной волны значительно большей, чем диаметр таких молекул, сталкиваются с ними, то рассеянные волны от двух ядер должны заметно интерферировать. В ортоводороде обе рассеянные волны будут, конечно, иметь одинаковый знак у фаз. Однако в параводороде интерференция между волнами, рассеянными от различных атомов, будет приводить к ослаблению интенсивности, если соответствующие значения α для синглетного и триплетного состояний имеют противоположные знаки, и к усилению интенсивности, если они имеют одинаковые знаки. Следовательно,

если рассеяние от параводорода меньше, чем рассеяние от ортоводорода, то можно заключить, что величина α положительна и что синглетный уровень виртуальный. Опыт показывает, что это так и есть в действительности [59].

Зная значение α , мы можем теперь решить вопрос о глубине синглетного потенциала, предполагая, что потенциальная яма имеет прямоугольную форму. Из уравнений (21.83б), (21.83в) и (21.84а) находим $\alpha = k_1 \operatorname{ctg} k_1 a$. Так как α вычислено при $E = 0$, то мы имеем

$k_1 \cong \sqrt{2mV_s}/\hbar$, где V_s — глубина синглетной ямы. Величину V_s можно найти, решая это уравнение. Так как $\alpha \cong 0$, то приближенно будем иметь $k_1 a \cong \pi/2$ и

$$V_s \cong \left(\frac{\pi}{2} \frac{\hbar}{a}\right)^2 \frac{1}{2m}.$$

Глубина оказывается порядка 12 Мэв. Приближенная формула для синглетного поперечного сечения (пригодная для низких энергий) будет тогда (согласно уравнению (21.88))

$$S_s \cong \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{1}{E + \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}}.$$

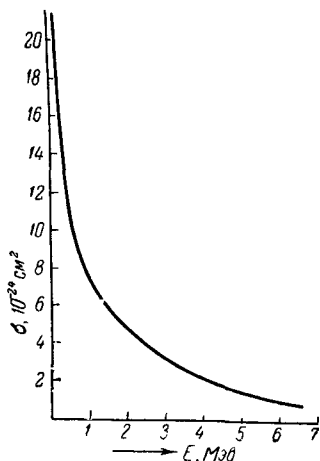


Рис. 115.

(Заметим, что так как для синглетного состояния α мало, то можно пренебречь множителем $1/(1-\alpha a)^2$, появляющимся в уравнении (21.88).) Здесь удобно ввести

величину $\hbar^2\alpha^2/2m = W$, которая имеет размерность энергии и численно приближенно равна энергии «виртуального» или резонансного уровня, существующего вблизи $E = 0$ для случая антипараллельных спинов. Тогда полное поперечное сечение равно

$$S = \frac{3}{4} S_n + \frac{1}{4} S_s \cong \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left[\frac{3}{4} \frac{1}{E + \frac{B}{(1-\alpha_0 a)^2}} + \frac{1}{4} \frac{1}{E + W} \right]. \quad (21.91)$$

Общая форма поперечного сечения как функции энергии показана на рис. 115. Резкий рост при малых энергиях вытекает, конечно, из резонанса в синглетном состоянии. Выражение (21.91) хорошо согласуется с опытом только при малых энергиях. Чтобы получить более точные результаты или перейти к более высоким энергиям, нужно или пользоваться более точным разложением α [60], или строго решить уравнение Шрёдингера.

57. Сравнение с экспериментом: измерения радиуса действия потенциала. В тех приближениях, которыми мы до сих пор пользо-

вались, полученные результаты для поперечного сечения как функции энергии не зависят заметно от предполагаемого радиуса действия потенциала, а определяются главным образом энергией связи дейтрона и поперечными сечениями рассеяния при малых энергиях (см. уравнение (21.91)). Если пользоваться более точным приближением, то мы нашли бы, что зависимость поперечного сечения от энергии определяется в какой-то мере также и радиусом действия потенциала. Однако вплоть до 5 Мэв любые изменения этого радиуса, разумные с точки зрения общих представлений ядерной физики, привели бы к изменениям величины поперечных сечений самое большее на 25%. Так как точность опытов по нейтронно-протонному рассеянию не превышает 10%, то этими результатами трудно пользоваться для определения радиуса действия с большей точностью. Его можно определить лишь в грубых пределах. Однако полученный таким образом радиус существенно зависит от точной формы потенциала, а при этом весьма сомнительно, что прямоугольная потенциальная яма имеет правильную форму.

В итоге всего этого рассмотрения следует отметить, что триплетное рассеяние вплоть до 5 Мэв приблизительно определяется энергией связи дейтрона. Синглетное рассеяние приблизительно определяется поперечными сечениями нейтронно-протонного рассеяния при малых энергиях (близких к нулю) (см., например, [60, 61]). Чтобы получить более точные данные по рассеянию, такие же, как в приводимых выше ссылках, мы должны наложить ограничения на радиус действия потенциала (т. е. на область, в которой он имеет значительную величину). Найдено, что триплетная и синглетная потенциальные ямы должны иметь различные радиусы, причем наилучшие значения будут порядка $(1,5 \pm 0,5) \cdot 10^{-13}$ см для триплетной ямы и $(2,6 \pm 0,5) \cdot 10^{-13}$ см для синглетной. Итак, радиус и глубина потенциальной ямы теперь сравнительно хорошо известны, но дальнейшие детали (такие, как форма потенциала) могут быть получены только из более точных данных по рассеянию или из данных, полученных при более высоких значениях энергии (где, как мы видели, поперечное сечение сильнее зависит от формы потенциальной ямы). Однако следует еще раз подчеркнуть, что наши знания о ядерных силах еще весьма несовершенны и приблизительны, и несомненно, что для полного описания явлений, происходящих при более высоких энергиях, необходимы точные сведения о виде потенциала этих сил. Однако существующих представлений уже достаточно по крайней мере до энергий ~ 25 Мэв.

В этой связи стоит упомянуть, что значительно легче производить точные опыты по протон-протонному, чем по нейтрон-протонному рассеянию, так как энергию бомбардирующих протонов можно очень точно контролировать, используя электромагнитные свойства протона, которые также весьма облегчают способ обнаружения этих частиц. Вместе с тем изучать оба эти типа столкновений было бы необходимо

в том случае, если не было бы оснований считать, что силы, действующие между нейтроном и протоном, точно такие же, как и между двумя протонами. Из имеющихся сейчас экспериментальных данных следует, что эти силы весьма похожи друг на друга, за тем исключением, что между нейтроном и протоном не действует кулоновская сила. К сожалению, эта кулоновская сила сильно увеличивает трудность теоретической трактовки протон-протонного рассеяния*).

53. Кулоновское рассеяние. Как было показано в п. 41, метод Релея, Факсена и Хольтсмарка неприменим в случае кулоновского потенциала, потому что волновая функция не стремится к значению $\sin(kr + \delta)$ при $r \rightarrow \infty$, где δ — определенный фазовый фактор. Вместо этого фазовый фактор δ изменяется пропорционально $\ln r$.

Есть два способа решения этой задачи для кулоновского потенциала. Во-первых, можно воспользоваться тем обстоятельством, что кулоновские потенциалы фактически экранируются на некотором расстоянии r_0 , и таким образом вернуться к методу Релея, Факсена и Хольтсмарка. Однако этот метод весьма громоздок, так как сдвиг фаз будет большим даже для парциальных волн, соответствующих очень большим моментам количества движения. Поэтому в разложении (21.63) для парциальных волн надо будет сохранять много членов. Мы укажем здесь на более удобный метод [28, 14], в котором не используется разложение по парциальным волнам, а ищется сразу полная волновая функция. В этом методе решение проводится в параболических координатах. Заметим прежде всего, что если за ось z выбрать направление падающей волны, то вся система будет обладать цилиндрической симметрией и волновая функция будет функцией только r и z и не будет зависеть от φ . Следовательно, можно написать $\psi = \psi(r, z)$. Переход к параболическим координатам совершается с помощью следующих формул:

$$\left. \begin{aligned} \xi &= r - z, & r &= \frac{\eta + \xi}{2}; \\ \eta &= r + z, & z &= \frac{\eta - \xi}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (21.92)$$

Задача 15. Доказать, что линии $\xi = \text{const}$ и $\eta = \text{const}$ являются ортогональными параболой (в плоскости $\varphi = \text{const}$).

Задача 16. Показать, что

$$\nabla^2 \psi = \frac{4}{\xi + \eta} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{\xi \eta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (21.93)$$

*) Вопрос о кулоновском рассеянии рассмотрен в п. 58. Относительно протон-протонного рассеяния см. [62]. Для более общего ознакомления с состоянием проблемы рассеяния элементарных ядерных частиц см. [60].

Из предыдущей задачи мы получаем волновое уравнение в параболических координатах, используя тот факт, что ψ не является функцией φ :

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{4}{\xi+\eta}\right)\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial\psi}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial\psi}{\partial\eta}\right)\right]+\frac{2Z_1Z_2e^2}{\xi+\eta}\psi=E\psi^*), \quad (21.94)$$

где Z_1 — атомный номер рассеивающего ядра, Z_2 — атомный номер рассеянной частицы, E — приведенная энергия рассеиваемой частицы, а m — ее приведенная масса. (Если две частицы имеют одинаковый знак заряда, то произведение Z_1Z_2 положительно; в противном случае оно отрицательно.)

Покажем теперь, что искомое решение можно представить в таком виде:

$$\psi = e^{ikz} f(\xi) = e^{ik\frac{(\eta-\xi)}{2}} f(\xi), \quad (21.95a)$$

для которого

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (21.95b)$$

Мы докажем правильность этого решения, если покажем возможность такого выбора $f(\xi)$, чтобы ψ удовлетворяло дифференциальному уравнению (21.94) и соответствовало граничным условиям.

Прежде всего подставим ψ в уравнение (21.94):

$$\xi \frac{d^2 f}{d\xi^2} + (1 - ik\xi) \frac{df}{d\xi} - nkf = 0, \quad (21.96a)$$

где

$$n = \frac{Z_1 Z_2 e^2 m}{\hbar^2 k} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v}, \quad (21.96b)$$

v — скорость падающей частицы. Уравнение (21.96a) совпадает с уравнением

$$z \frac{d^2 F}{dz^2} + (b - z) \frac{dF}{dz} - aF = 0, \quad (21.97)$$

которому удовлетворяет гипергеометрическая функция

$$F = F(a, b, z) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+s) \Gamma(b)}{\Gamma(b+s) \Gamma(a)} \frac{z^s}{s!}. \quad (21.98)$$

*) Заметим, что если однородное электрическое поле, приложенное в направлении оси z , создает потенциальную энергию $e\mathcal{E}z_1 = e\mathcal{E}(\eta - \xi)/2$, то волновая функция также разделяется в параболических координатах. Поэтому эффект Штарка в водороде может быть строго решен таким же методом (см. гл. 19, п. 11).

Таким образом, решение уравнения (21.96a) (см. [33], гл. 14) имеет вид степенного ряда, сходящегося вблизи начала координат:

$$f(\xi) = CF(-in, 1, ik\xi), \quad (21.99)$$

где C — постоянная, которую нужно определить.

Чтобы удовлетворить граничным условиям, требуем определенный вид для асимптотического значения функции $\psi(\xi)$. Первые два члена этого разложения имеют вид ([33], гл. 14)

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{Ce^{1/2n\pi}}{\Gamma(1+in)} \left\{ e^{i[kz - n \ln k(r-z)]} \left[1 - \frac{n^2}{ik(r-z)} \right] + \frac{f_C(\theta)}{r} e^{i(kr - n \ln 2kr)} \right\}, \quad (21.100)$$

где

$$f_C(\theta) = \frac{\Gamma(1+in)}{i\Gamma(1-in)} \frac{e^{-in \ln \sin(\theta/2)}}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} = \frac{n}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} e^{-in \ln [\sin^2(\theta/2)] + i\pi + 2i\alpha_0} \quad (21.101a)$$

с

$$\alpha_0 = \arg \Gamma(1+in). \quad (21.101b)$$

59. Интерпретация полученных результатов. Заметим, что кулоновская волновая функция не приближается асимптотически к форме (21.43):

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

В первом члене правой части уравнения (21.100) кроме множителя e^{ikz} содержится еще и другой множитель $e^{-in \ln k(r-z)} \left[1 - \frac{n^2}{ik(r-z)} \right]$. Последний указывает на то, что падающая плоская волна несколько искажена, причем несущественно, насколько далеко от начала координат при этом мы находимся. Это искажение, конечно, является следствием дальнего действия характера кулоновской силы. Аналогично мы видим, что расходящаяся волна содержит множитель $e^{-in \ln 2kr}$, поэтому она не приближается к определенной фазе. Однако, несмотря на эти дальнего действия эффекты, все же возможно определить поперечное сечение рассеяния, потому что искажающие факторы так изменяют физически наблюдаемые величины (такие, как средний ток), что эти искажения стремятся к нулю при $r \rightarrow \infty$. Чтобы доказать это, вычислим падающий ток, обусловленный первым членом правой части уравнения (21.100). Выражение для тока равно

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \text{grad } \psi - \psi \text{ grad } \psi^*). \quad (21.102)$$

Заметим, что дифференцирование логарифмического члена дает множитель $1/r$. При больших r этот член становится очень малым

по сравнению с членом, который получается от дифференцирования величины e^{ikz} . Следовательно, при больших r направление тока падающих частиц очень близко к оси z , а по величине ток приближенно равен

$$j_l = \frac{\hbar k}{m} \frac{|C|^2}{|\Gamma(1+in)|^2}. \quad (21.103)$$

Точно так же ток рассеянных частиц, рассчитанный на единичный телесный угол, равен приближенно

$$j_0 = \frac{\hbar k}{m} \frac{|C|^2 |f_C(\theta)|^2}{|\Gamma(1+in)|^2}. \quad (21.104)$$

Согласно уравнению (21.45а), поперечное сечение на единицу телесного угла будет тогда равно

$$\sigma = |f_C(\theta)|^2 = \frac{n^2}{\left(2k \sin^2 \frac{\theta}{2}\right)^2} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2m v^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (21.105)$$

Полученное выражение в точности совпадает с Резерфордской формулой для поперечного сечения (см. формулу (21.16в)). Как уже указывалось, вследствие специфической особенности кулоновской силы и точный классический, и точный квантовый расчеты, а также и квантовомеханический расчет в борновском приближении — все приводят к одной и той же формуле для поперечного сечения рассеяния.

60. Обменные эффекты при кулоновском рассеянии. Если две тождественные заряженные частицы рассеивают друг друга, то полученное выше кулоновское поперечное сечение должно быть изменено из-за влияния обменных эффектов. Рассмотрим, например, рассеяние α -частиц друг на друге. Полный спин частиц равен нулю, и поэтому волновая функция симметрична. (Симметрия волновой функции следует из того, что каждая α -частица состоит из двух нейтронов и двух протонов. Следовательно, когда две частицы обмениваются местами, то при этом обмениваются одновременно четыре элементарные частицы. Волновая функция умножается на $(-1)^4 = 1$, поэтому в результате такого обмена она становится симметричной.)

При построении подходящей симметричной волновой функции заметим, что из любого решения уравнения Шрёдингера для двух эквивалентных частиц $F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ получается другое решение в результате обмена местами $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$. Искомая симметричная функция будет тогда равна $F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + F(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$. При столкновении двух частиц волновая функция имеет вид $e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/m_1 + m_2} f(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ (см. гл. 15, п. 5). Тогда симметричная волновая функция равна

$$\psi = e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/m_1 + m_2} [f(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + f(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)]. \quad (21.106)$$

Экспоненциальный множитель относится к однородному движению центра масс, в то время как другой множитель является функцией только относительных координат. Следовательно, волновая функция в относительных координатах может быть найдена, если в функции $f(\mathbf{r}) + f(-\mathbf{r})$ положить $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

Из уравнения (21.106) мы получаем, учитывая, что при замене $\mathbf{r}$ на $-\mathbf{r}$ нужно изменить θ на $\pi - \theta$:

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{Ce^{i/2 n \pi}}{\Gamma(1 + in)} \left\{ e^{ikz - n \ln k(r-z)} \left[1 - \frac{n^2}{ik(r-z)} \right] + \right. \\ \left. + e^{i[-kz - n \ln k(r+z)]} \left[1 - \frac{n^2}{ik(r+z)} \right] + \frac{e^{ikr - n \ln 2kr}}{r} [f_c(\theta) + f_c(\pi - \theta)] \right\}.$$

Эта волновая функция соответствует падению одной из частиц справа, а другой — слева относительно центра инерции системы. Мы получаем поперечное сечение так же, как и в случае уравнения (21.45а), из отношения рассеянного тока, рассчитанного по единице телесного угла, к падающему току, проходящему через единицу площади. Заметим, что на этот раз волновая функция не делится на $\sqrt{2}$ при ее симметризации, так как мы хотим нормировать к $\hbar k/m$ падающий ток для каждой частицы на единицу площади. Поперечное сечение равно

$$\sigma = |f_c(\theta) + f_c(\pi - \theta)|^2. \quad (21.107)$$

Здесь m — относительная масса $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, а E — относительная энергия. Из уравнения (21.101а) окончательно получаем

$$\sigma = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2mv^2} \right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\theta}{2}} + \frac{2 \cos n \left(\ln \operatorname{tg}^2 \frac{\theta}{2} \right)}{\sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}} \right]. \quad (21.108)$$

Первые два члена в этом выражении такие же, какие получились бы в классической теории для тождественных частиц *). Третий член обусловлен явлением интерференции, и он целиком специфически квантовый. Это выражение впервые получил Мотт, и поэтому оно называется формулой рассеяния Мотта.

Для таких частиц, как электроны или протоны, которые имеют антисимметричные полную пространственную и спиновую волновые функции, надо учесть, что пространственная волновая функция $1/4$ времени симметрична и $3/4$ времени антисимметрична (см. гл. 17, п. 10). Тогда получаем

$$\sigma = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2mv^2} \right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\theta}{2}} - \frac{\cos n \left(\ln \operatorname{tg}^2 \frac{\theta}{2} \right)}{\sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}} \right]. \quad (21.109)$$

*) Первые два члена могут быть получены, например, из п. 14.

Специфические «обменные» эффекты оказываются наибольшими при $\theta = 90^\circ$ (45° в лабораторной системе координат). При этом значении угла обменные эффекты для α -частиц обуславливают вдвое большее поперечное сечение, чем то, которое получается, если пренебречь этими обменными эффектами.

Добавочные интерференционные члены, соответствующие моттовскому рассеянию, целиком согласуются с данными эксперимента (см. [28], стр. 73). Заметим, однако, что в классическом пределе ($\hbar \rightarrow 0$ и $n \rightarrow \infty$) обменный член становится очень быстро колеблющейся функцией θ , которая при усреднении дает нуль. Таким образом, если измерения допускают ошибку $\Delta\theta$, то, по мере того как $\hbar$ можно считать все меньшим, эффект обменных членов становится слишком малым, чтобы его можно было наблюдать. Поэтому обменные эффекты и являются по существу квантовомеханическими и исчезают в классическом пределе (см. гл. 19, п. 29).

Примечание редактора к гл. 21

В связи с этим также следует заметить, что объективная природа тождественности частиц проявляется в особых, специфических для них свойствах, которые отсутствуют для совокупностей различных частиц. К сожалению, иногда абсолютизируют момент тождественности («принципиальной неразличимости») и отсюда приходят к агностицизму. По существу же здесь никакого агностицизма нет, ибо квантовая механика открыла новые объективные свойства материи, связанные с системами одинаковых частиц (например, явления обмена и т. п.), которые не могли быть учтены в более грубой классической теории.

ГЛАВА 22

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ПРОЦЕССА ИЗМЕРЕНИЯ

1. Введение. Изложенная выше квантовая теория позволяет в принципе вычислить вероятности результатов любого желаемого измерения. Для вычисления среднего значения какой-нибудь наблюдаемой величины A следует записать $\bar{A} = \int \psi^* A \psi dx$, где ψ — волновая функция исследуемой системы. Однако если квантовая теория способна дать полное описание всего, что может произойти во вселенной, то она должна иметь возможность описать также сам процесс наблюдения через волновые функции измерительной аппаратуры и исследуемой системы. Кроме того, в принципе квантовая теория должна описать и самого исследователя, наблюдающего явления при помощи соответствующей аппаратуры и изучающего результаты эксперимента, на этот раз через волновые функции различных атомов, составляющих этого исследователя, а также через волновые функции измерительной аппаратуры и исследуемой системы. Другими словами, квантовую теорию нельзя рассматривать как замкнутую логическую систему, если она не будет включать в себя, по крайней мере принципиально, способ решения этой задачи.

В этой главе мы покажем, как можно рассматривать все эти вопросы в рамках квантовой теории (другую трактовку см. в [63]).

2. Свойства измерительной аппаратуры. Мы начнем с описания общих свойств измерительной аппаратуры. Во всех случаях все сведения о микроявлениях получают путем изучения взаимодействия интересующей нас системы, обозначаемой далее через S , с измерительной аппаратурой, обозначаемой символом A . Любое тело, свойства которого изучены хотя бы частично, можно в принципе использовать в качестве измерительной аппаратуры. Например, часто изучают силы, действующие между нейтронами и протонами, исследуя, как они рассеиваются друг на друге. В этом случае недостаточно полно изученные силы между частицами исследуются по тем эффектам, которые они оказывают на лучше изученное поступательное движение

тех же частиц. Наконец, следует указать, что не обязательно всякая измерительная аппаратура должна быть сконструирована человеком, а также находиться в лаборатории. Так, например, магнитное поле Земли можно рассматривать как часть естественного масс-спектрографа, который разделяет частицы космических лучей по их энергиям и зарядам.

Хотя каждое наблюдение производится при взаимодействии, но одного факта взаимодействия самого по себе еще недостаточно, чтобы получить существенный результат от наблюдения. Необходимо выполнить еще одно условие, а именно: после того, как имело место взаимодействие, требуется надежным и воспроизводимым способом установить связь между измерительной аппаратурой A и состоянием системы S . Эта связь в общем случае является статистической, но в предельных случаях можно достичь любой степени точности. Так можно измерить местоположение звезды, наблюдая расположение пятна на фотографической пластинке, которое вызвано пучком света от звезды, после его прохождения через телескоп. Здесь взаимодействие между звездой и фотопластинкой осуществляется электромагнитными силами, создаваемыми световыми волнами. Эти силы способны изменить условия химического взаимодействия атомов серебра в светочувствительной эмульсии. Идеальная система из телескопа и фотографической камеры должна была бы дать однозначную связь между расположением звезды и пятном на пластинке. Однако в подобных реальных системах она никогда не получается совершенно точной, во-первых, из-за существующих в действительности неизбежных погрешностей измерений и, во-вторых, потому, что даже в принципе волновая природа света обуславливает конечную разрешающую способность. Следовательно, в обычной измерительной аппаратуре получаемая связь такова, что каждому точно определенному состоянию аппаратуры соответствует область возможных состояний исследуемой системы. Эту область можно назвать *неопределенностью* или *ошибкой* измерений. Возможность ошибки, обычно возникающая из-за дефектов или несовершенств измерительной установки, может быть принципиально устранена. Однако и при предельно точных измерениях ошибка может возникнуть как следствие квантовой природы вещества. В этом случае нельзя произвести более точных измерений, не изменяя фундаментальным образом объекта наблюдения (см. гл. 5).

3. Классические свойства измерительной аппаратуры. Напомним здесь основной результат гл. 8, согласно которому в рамках квантовой точности надо считать, что вся вселенная (включая, конечно, и всех наблюдателей) образует единое, неделимое целое, причем каждый объект связан со своим окружением неделимым и не полностью контролируемым квантом (см. гл. 8, пп. 23 и 24, а также гл. 6, п. 13). Если бы было необходимо дать *всем* частям мира

полное квантовомеханическое описание, то тот, кто пытался бы применить квантовую теорию к процессу наблюдения, был бы поставлен перед неразрешимым парадоксом, потому что наблюдатель должен был бы рассматривать самого себя как нечто неотделимо связанное с остальным миром. С другой стороны, сама идея проведения наблюдения подразумевает, что наблюдаемое вещество полностью отделено от наблюдающего его субъекта.

Этого парадокса можно избежать, если учесть тот факт, что все действительные наблюдения в своей конечной стадии могут быть описаны классически *). Поэтому наблюдатель может игнорировать неизбежные конечные квантовые связи между ним самим и классически описываемой частью измерительной аппаратуры, посредством которой он получает свою информацию, так как эти связи создают эффекты, слишком малые, чтобы существенно изменить результаты его наблюдений **). Другими словами, взаимодействие между наблюдателем и его аппаратурой таково, что статистические флуктуации, возникающие вследствие квантового характера взаимодействия, ничтожно малы по сравнению с погрешностью опыта. Поэтому при определении связи между наблюдателем и его измерительной аппаратурой мы можем предположить, что в упрощенном представлении и наблюдатель, и аппаратура являются двумя различными и разделенными системами, взаимодействующими только по законам классической физики. Кроме того, любое число наблюдателей может взаимодействовать с одной и той же аппаратурой, не изменяя ее существенных свойств. Поэтому можно считать, что различные возможные конфигурации или состояния измерительной аппаратуры, соответствующие различным возможным результатам измерений, существуют совершенно отдельно и независимо от всех исследователей. При такой точке зрения квантовая теория измерительного процесса может быть сведена к описанию связи между состоянием изучаемой системы и состоянием какой-то классически описываемой части измерительной аппаратуры. (В этом смысле это, конечно, то же самое, что делалось и в классической теории.)

Однако предыдущие рассуждения неточны и пригодны лишь для указания общего приближения, согласно которому можно оправдать применение обычной классической процедуры, когда наблюдатель

*) Мы можем сослаться на пример из обычной научной практики, когда наблюдаются данные измерения длины метра, пятна на фотопластинке, отсчеты счетчика Гейгера и т. д. Все эти примеры и явления обладают тем общим свойством, что они могут быть описаны классически. Небольшое размышление убедит читателя, что все наблюдения, когда-либо производимые в науке, включают, по крайней мере одну, такую классически описываемую стадию.

**) Если исследователь желает изучать квантовые свойства вещества, то ему потребуется аппаратура, которая усилит влияние отдельного кванта до классически описываемого эффекта.

и его аппаратура рассматриваются как отдельные системы, хотя в действительности они связаны неустранимым квантовым взаимодействием. Дальше в этой главе мы дадим более точное, но сравнительно простое математическое рассмотрение того, что происходит в процессе наблюдения, и покажем, что по существу получаются те же самые результаты.

Если нельзя провести резкого разграничения между наблюдателем и исследуемой системой, то, как мы знаем, нельзя проводить научного исследования, потому что исследователь не будет знать, какая часть результата наблюдений вызвана им самим и какая относится к внешней интересующей его системе. Но мы не хотим полагать, что научное исследование совершенно невозможно, если наблюдатель в значительной степени взаимодействует с теми предметами, которые он хочет наблюдать. Действительно, если наблюдатель может прокорректировать влияние своих взаимодействий на основе известных классических динамических законов, то он может установить различие между эффектами, возникающими в нем самом, и эффектами, обусловленными внешней системой *). Но если, например, взаимодействие осуществляется при помощи одного неделимого и неконтролируемого кванта, то такой поправки внести нельзя. Тогда наблюдатель неспособен указать, относится ли то, что он видит, к нему или к внешнему объекту, так как соединяющее их квантованное взаимодействие принадлежит взаимно и неделимо к обоим системам. Так как взаимодействие между одушевленным наблюдателем и измерительной аппаратурой во всех реальных наблюдениях описывается классически, то эта трудность, конечно, никогда в действительности не возникает **).

4. Степень произвольности при установлении различия между наблюдателем и наблюдаемым. В случае, когда имеется более чем только классически описываемая часть аппаратуры, какую-нибудь одну часть можно выбрать как границу раздела между наблюдателем и тем, что он исследует. Рассмотрим, например, опыт, в котором наблюдатель получает сведения посредством фотографирования. Одним

*) См., например, гл. 5, п. 9, где обсуждается случай, в котором влияние аппаратуры учитывается на основе известных классических законов.

**) В связи с изложенным в п. 3 следует заметить, что автор прав, когда он подчеркивает единство материального мира и относительность разделения его на измеряемую часть и его окружение — измерительную аппаратуру (включая и самого человека — наблюдателя). Но неизбежность и конечность взаимодействия между микрообъектом и его «классическим» окружением (в частности, измерительной аппаратурой) отнюдь нельзя рассматривать как «принципиально» неконтролируемое взаимодействие (это неясно принимается автором, который пользуется термином «uncontrollable quantum»). В рамках квантовой механики мы изучаем объективные законы взаимодействия микрообъектов с классическим материальным окружением и тем самым познаем многие физические свойства микрочастиц, которые ранее, при учете только чисто макроскопических связей, нам были неизвестны. — *Прим. ред.*

из возможных описаний этого опыта может быть такое: изучаемая система состоит из объекта фотографирования, фотокамеры и света, соединяющего объект с изображением. Тогда наблюдатель говорит, что он получает сведения, глядя на пластинку. Так как этот процесс можно описать классически, то существует отчетливое различие между наблюдателем и пластинкой, которую он рассматривает. Однако столь же хорошим описанием этого опыта является такое, когда в качестве наблюдаемой системы рассматривается сам объект. Тогда камеру и пластинку можно считать как часть наблюдателя. Третье описание того же опыта можно было бы получить, если принять, что наблюдатель видит изображение на сетчатке своего глаза, и тогда сетчатку глаза и весь остальной мир, включая, конечно, и фото-пластинку, надо рассматривать как исследуемую систему.

В итоге этих рассуждений можно сказать, что процесс, при помощи которого наблюдатель получает свои сведения, обычно состоит из ряда классически описываемых стадий. Если связь между наблюдателем и тем, что он видит, позволяет ему получить надежную информацию, то эти стадии должны быть связаны причинными законами так, что определенное состояние одной стадии приводит однозначным путем к соответствующему определенному состоянию следующей стадии. Так, например, определенное пятно на объекте наблюдения должно создавать соответствующее пятно на фотопластинке, а это в свою очередь создает соответствующее пятно на сетчатке глаза. В той мере, в какой существует это соответствие, можно правильно отделить наблюдателя от того, что он видит, для *любой* классически описываемой стадии.

Теперь можно спросить, сколь далеко можно провести это различие в любом направлении, т. е. в исследуемом объекте или в мозгу самого наблюдателя. Критерием для классически точно определяемой части аппаратуры является ее способность давать информацию о природе объекта однозначным путем. Поэтому единственное остающееся ограничение того, насколько далеко можно провести это разграничение в самом объекте, определяется тем, что его нельзя проводить на существенно квантовомеханической стадии опыта. Если мы хотим наблюдать положение и импульс электрона с квантовомеханической точностью, то мы должны рассматривать электрон и кванты света, используемые для наблюдения, как часть единой сложной системы. Однако в конечном счете эти кванты света способны привести к классически описываемым процессам, например, создавать пятна на фотографической пластинке, и именно в этом пункте может быть проведено указанное различие.

Рассмотрим теперь задачу, насколько далеко в мозг может проникнуть различие между наблюдателем и тем, что наблюдается. Однако, прежде чем это сделать, мы хотим подчеркнуть, что это совершенно не относится к делу, пока речь идет о теории изме-

рений, поскольку, как мы видели, необходимо лишь довести анализ до некоторого классически описываемого состояния аппаратуры. Но несмотря на это, вероятно, интересно привести некоторые общие рассуждения об этой заманчивой общей проблеме, которая пока мало разработана.

Если, например, как принималось в гл. 8, п. 28, мозг содержит существенно квантовомеханические элементы, то рассматриваемое различие не может проникнуть дальше этих элементов. Даже если мозг функционирует классически описываемым путем, то различие может переставать быть произвольным, потому что реакция мозга может не быть в простом однозначном соотношении с поведением исследуемого объекта. Чтобы проиллюстрировать круг рассматриваемых задач, мы можем начать со зрительного нерва, который описывается почти классическим путем. Этот нерв, по-видимому, действует исключительно как сигнальная установка, так что он однозначно реагирует на изображение, появляющееся на сетчатке. Следовательно, можно сказать, что наблюдатель получает визуальную информацию, наблюдая сигналы, приходящие по зрительному нерву. Сигналы, подобные тем, которые обусловлены светом, могут быть получены при помощи электрического или механического раздражения этого нерва. Если попытаться провести этот тип описания значительно дальше в мозг, то мы станем на более спекулятивную почву. Однако, по-видимому, прежде чем наблюдатель начнет осознавать эти сигналы, они должны пройти через несколько добавочных сложных систем нервных сплетений, которые выполняют главным образом функцию опознания видимого предмета. Удаление определенных частей мозга, как известно, приводит к тому, что предмет не может быть узан даже тогда, когда глаз и зрительный нерв в хорошем состоянии. Таким образом, по-видимому, можно сказать, что человек воспринимает сигналы после того, как они уже прошли через ту часть мозга, которая несет ответственность за опознавание объекта.

Практически до сих пор ничего не известно в деталях о том, что происходит с сигналом в следующей стадии. Однако есть веские основания предполагать, что описание с помощью представления о распространении сигнала, который находится в однозначном соответствии с поведением объекта, в конце концов становится неадекватным. Причина этого в том, что нервные цепочки в мозгу часто допускают подачу импульсов, достигших более поздних точек, обратно в более ранние точки. Если это происходит, то тогда уже неправильно говорить, что роль данного нерва заключается только в передаче внешних сигналов, потому что каждый нерв может тогда запутанным (или нелинейным) образом смешать эффекты сигналов, приходящих из других частей мозга, с эффектами внешних сигналов. Когда достигнуто это состояние, то разделение на две различные

системы, т. е. на наблюдателя и остальной мир, становится непригодным и, наоборот, лучше сказать, что все части мозга существенно связаны этой обратной связью в одно целое. Вот это действие мозга как одного целого и следует, вероятно, рассматривать в качестве процесса, при помощи которого наблюдатель начинает отдавать себе полный отчет о поступающем сигнале. Поэтому весьма вероятно, что деление между наблюдателем и остальным миром не может быть продолжено произвольно глубоко в мозг.

Ввиду того, что мы слишком мало знаем о деталях функции мозга, очень хорошо, что анализ измерения следует проводить только до классически описываемой части аппаратуры.

5. Математическая трактовка процесса наблюдения. Квантово-механическое описание процесса наблюдения мы должны начать с решения уравнения Шрёдингера, принимая во внимание влияние измерительной аппаратуры. До начала опыта измерительная аппаратура A и исследуемая система S в общем случае не связаны друг с другом. Например, при фотографировании мы связываем пластинку со снимаемым предметом, открывая на некоторое определенное время затвор. Перед этим отсутствовало взаимодействие между пластинкой и предметом. Читатель может легко убедиться, что требование отсутствия связи перед началом опыта удовлетворяется во всех практических процессах измерения. При отсутствии взаимодействия между A и S оператор Гамильтона имеет вид

$$H = H_S + H_A = H_S(x) + H_A(y), \quad (22.1)$$

где H_S — гамильтониан изолированной исследуемой системы, а H_A — гамильтониан одной аппаратуры. Отсутствие связи между этими двумя гамильтонианами математически выражается тем, что H_S является функцией только переменных x , а H_A — только переменных y .

В этой элементарной трактовке мы для простоты полагаем, что перед началом измерения аппаратура находится в достаточно определенном состоянии. Состояние аппаратуры определяется при этом волновой функцией $f(y, t)$. Временная зависимость $f(y, t)$ означает, что сама аппаратура может изменить свое состояние. Пока нам нет необходимости более точно знать вид функции $f(y, t)$. Однако следует заметить, что так как измерительная аппаратура должна допускать классический способ описания, то функция $f(y, t)$ должна всегда принимать вид волнового пакета. Последний определяется значительно менее точно, чем пределы точности, следующие из соотношения неопределенностей (гл. 10, п. 9). Для рассмотрения конкретного примера можно допустить, что координата y представляет собой положение стрелки амперметра. Тогда волновой пакет $f(y, t)$ дает степень точности определения положения этой стрелки. Предположим, что собственный период колебаний этой стрелки равен $0,1 \text{ сек.}$

Разность энергий для соседних квантовых состояний будет тогда равна

$$\Delta E = h\nu \cong 6,6 \cdot 10^{-26} \text{ эрг.}$$

Чтобы получить оценку максимального смещения x стрелки, соответствующего одному квантовому скачку, воспользуемся формулой для энергии

$$E = \frac{m}{2} \omega^2 x^2, \quad \Delta E = m \omega^2 x \Delta x, \quad \text{или} \quad \Delta x = \frac{\Delta E}{m \omega^2 x}.$$

Взяв $x \cong 1 \text{ мм}$ для смещения стрелки и $m \cong 1 \text{ мг}$, получаем $\Delta x = 10^{-20} \text{ см}$. Ясно, что ни при каких обстоятельствах не удалось бы пользоваться амперметром, точность которого приближалась бы к квантовому уровню точности.

Что касается исследуемой системы, то ее состояние неизвестно, но это как раз и является целью измерений — получить об этом некоторые сведения. Предположим, что волновая функция системы S разложена в ряд по некоторой ортогональной и нормированной системе функций $v_m(x, t)$, являющейся решением уравнения Шрёдингера для одной системы, т. е.

$$\psi_S = \sum_m C_m v_m(x, t), \quad (22.2)$$

где C_m — неизвестные коэффициенты.

После того, как аппаратура начинает взаимодействовать с системой S , в гамильтониане появляется третий член, который мы обозначим через $H_I(x, y)$. Таким образом, получим

$$H = H_S(x) + H_A(y) + H_I(x, y). \quad (22.3)$$

Именно член $H_I(x, y)$ вводит связь между состояниями системы S и аппаратуры A и тем самым дает возможность произвести измерение. Как будет видно ниже, прежде чем эта связь станет достаточно сильной, чтобы появилась возможность сделать определенное измерение, взаимодействие должно продолжаться определенный минимальный интервал времени Δt , который обратно пропорционален величине взаимодействия. Поэтому, если взаимодействие выключается слишком быстро, то измерения не получится. Однако взаимодействие может быть прекращено в любой момент после Δt , и в большинстве типов аппаратуры оно должно быть прекращено в пределах определенного периода времени для того, чтобы предотвратить нарушение регистрации эксперимента. Например, в фотокамере время взаимодействия регулируется затвором. Если это время слишком коротко, то снимок будет с недодержкой и не получится точного изображения. Минимальная экспозиция будет обратно пропорциональна интенсивности света, т. е. мощности взаимодействия. Однако если затвор остался

открытым слишком долго, то снимок будет передержан и опять будет нарушена регистрация эксперимента.

Всегда, когда результаты измерений зафиксированы (например, на фотографии, на проволоочной ленте, на перфокарте, при помощи карандашных пометок в блокноте или просто изменением положения или импульса какого-нибудь подходящего предмета), мы имеем такую ситуацию, при которой показания отделены от наблюдаемой системы, поэтому любое число наблюдателей может воспользоваться этими показаниями, не взаимодействуя с системой S . Действительно, это свойство включено в само определение регистрации эксперимента. Хотя и нет необходимости, чтобы результаты всех наблюдений были фактически где-то зафиксированы, но все результаты измерений, в принципе, могут быть зафиксированы. Для рассматриваемой нами цели — показать, что квантовая теория способна дать непротиворечивое объяснение процесса измерения, — будет достаточно ограничиться теми случаями, когда результаты измерений фактически фиксируются. Другими словами, мы предполагаем, что после некоторого времени конечная стадия установки (т. е. та часть ее, в которой фиксируются результаты) освобождена от связи с исследуемой системой. Так как процесс регистрации можно всегда, принципиально, сделать полностью автоматическим, то ясно, что, когда человек получает сведения, глядя на регистрирующий прибор, он не должен производить абсолютно никаких изменений в исследуемой системе S . Это означает, что все изменения в системе S (которые потом могут быть существенно квантовомеханическими) производятся только действиями аппаратуры, влияние же наблюдателя во время получения информации ограничивается классически описываемыми частями аппаратуры, где, как мы видели, это влияние не вносит заметных изменений.

После того, как имело место взаимодействие, состояние системы S может претерпеть изменение по двум причинам. Во-первых, исследуемые переменные могут не быть постоянными движения в невозмущенной системе S . Так, положение свободно движущейся частицы непрерывно изменяется с течением времени. Во-вторых, взаимодействие с измерительной установкой может ввести дальнейшие изменения в исследуемые переменные. Так, при измерении импульса заряженной частицы по следу, который она оставляет в камере Вильсона, аппаратура изменяет этот импульс как вследствие действия магнитного поля, систематически отклоняющего частицу, так и потому, что молекулы газа, с которыми частица сталкивается, сообщают ей небольшие беспорядочные отклонения.

Пока речь идет о теории измерений, изменения наблюдаемых переменных, осуществляющиеся в процессе измерения, вносят не относящиеся к делу осложнения. Вскоре мы увидим, что, в принципе, всегда возможно построить такие приборы, которые измеряют данные переменные, не изменяя их в процессе измерения (в связи с этим

см. также гл. 6, п. 3). (В согласии с соотношением неопределенностей, дополняющие друг друга переменные должны, конечно, изменяться не полностью контролируемым путем.) Один из методов достижения такого результата заключается в следующем. Во-первых, мы производим так называемое *мгновенное* измерение. Следовательно, время взаимодействия настолько коротко, что изменения переменной, которые должны были бы появиться без измерения, ничтожно малы. Так, например, мы можем измерять положение частицы при помощи такого короткого импульса света, что частица не сдвинется заметно, когда она рассеивает этот импульс. Однако, для того чтобы сфотографировать частицу за очень короткое время, требуется интенсивный источник света. Иными словами, мгновенное измерение требует приложения в течение короткого времени сильного взаимодействия между аппаратурой и исследуемой системой. В процессе мгновенного измерения члены $H_S(x)$ и $H_A(y)$ создают такие изменения в волновых функциях, которые пренебрежимо малы по сравнению с изменениями, создаваемыми членом взаимодействия $H_I(x, y)$. Следовательно, в это время (и только в это время) уравнение Шрёдингера можно записать в виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_I \psi. \quad (22.4)$$

Однако до и после взаимодействия имеем

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (H_A + H_S) \psi. \quad (22.5)$$

Таким образом, во время взаимодействия функции $u_n(y, t)$ и $v_m(x, t)$, являющиеся решениями уравнения Шрёдингера, когда $H_I = 0$, можно считать постоянными во времени. Мы будем ниже их обозначать как $u_n(y)$ и $v_m(x)$. Итак, при мгновенном измерении исключаются все изменения исследуемых переменных, которые происходят независимо от процесса взаимодействия.

Мы говорили, что для мгновенного измерения требуется большая энергия взаимодействия. Но если энергия взаимодействия велика, то как мы сможем избежать изменений в измеряемых переменных, которые вносятся самим процессом взаимодействия? Чтобы ответить на этот вопрос, обозначим наблюдаемые величины оператором M с собственными значениями m и собственными функциями $v_m(x)$. Если состояние аппаратуры связано как-то с состоянием переменной M , то необходимо, чтобы член H_I зависел по крайней мере от M так же, как и от y . Заметим теперь, что если H_I выбран диагональным в том же представлении, в каком диагональна величина M , то равны нулю матричные элементы, соответствующие переходам от одного значения m к другому. Это означает, что независимо от силы взаимодействия изменений в M не будет (хотя дополнительные наблюдаемые величины могут при этом значительно изменяться).

Чтобы член H_I был диагонален, когда диагональна величина M , выбираем H_I в виде

$$H_I = H_I(M, y). \quad (22.6)$$

Это означает, что H_I является функцией только M и y . Таким образом, мы достигли цели, спроектировав аппаратуру, при помощи которой данная переменная величина M может измеряться, не претерпевая сама никаких изменений.

Если наблюдаемая переменная изменяется во время измерения, то можно в общем случае внести поправку на эти изменения. Например, при измерении импульса с помощью доплеровского смещения (гл. 5, п. 9) мы видели, что импульс изменялся на определенную величину, на которую можно внести поправку. Мы не будем здесь доказывать, что такая поправка возможна в любом случае, но читатель после некоторых размышлений может убедиться в справедливости этого утверждения*). В этой книге мы дальше ограничимся обсуждением более простого случая, когда переменная M не изменяется во время измерения. Как мы видели, всегда, в принципе, возможно провести измерения таким образом. Следовательно, трактовка одного этого типа измерений адекватно показывает, что квантовая теория способна дать последовательное описание процесса измерений.

Теперь мы можем придать уравнению Шрёдингера для случая измерения импульса сравнительно удобную форму. Для этого рассмотрим полную волновую функцию $\psi(x, y, t)$, представляющую состояние системы S и аппаратуры A во время измерения. Если ψ рассматривать как функцию x , то ясно, что теорема разложения позволяет написать

$$\psi(x, y, t) = \sum_m f_m v_m(x), \quad (22.7a)$$

где $f_m = \int v_m^*(x) \psi(x, y, t) dx$, v_m — собственные функции оператора M . Из вышеизложенного мы видим, что f_m будут в общем случае функциями y и t , тогда

$$\psi(x, y, t) = \sum_m f_m(y, t) v_m(x) \quad (22.7b)$$

*) В этой связи надо заметить, что в некоторых случаях измерение может даже разрушить исследуемый объект, например, рассмотрим поглощение фотона. Считаем ли мы исследуемый объект разрушенным или нет, будет просто зависеть от выбора терминологии. Например, при ином описании поглощения фотона можно сказать, что определенный осциллятор излучения перешел в более низкое квантовое состояние, испуская при этом квант энергии. В этом описании наблюдаемая переменная (в данном случае энергия некоторого осциллятора излучения) будет не разрушаться, а только изменяться. Следовательно, к этому случаю также применимо общее рассуждение, что переменная может изменяться в процессе измерения.

и уравнение Шрёдингера (22.4) принимает вид

$$i\hbar \sum_m \frac{\partial f_m(y, t)}{\partial t} v_m(x) = \sum_m H_I f_m(y, t) v_m(x). \quad (22.8a)$$

Так как H_I является функцией M , то уравнение (22.8a) приводится к виду

$$i\hbar \sum_m \frac{\partial f_m(y, t)}{\partial t} v_m(x) = \sum_m H_I(m, y) v_m(x) f_m(y, t), \quad (22.8б)$$

где мы заменили оператор M числом m , соответствующим собственной функции, на которую действует оператор H_I . Умножая уравнение (22.8б) на $v_r^*(x)$ и интегрируя по x , находим

$$i\hbar \frac{\partial f_r(y, t)}{\partial t} = H_I(r, y) f_r(y, t). \quad (22.9)$$

Это означает, что состояние аппаратуры претерпевает изменения, которые различны для различных собственных значений r переменной M системы. Если взаимодействие достаточно сильно и если допустить, что оно продолжается в течение достаточно долгого времени, то изменения переменных, описывающих аппаратуру, будут настолько велики, что состояние последней будет главным образом зависеть от значения исследуемой величины M . Это и есть связь между двумя рядами наблюдаемых величин, которую необходимо определить, прежде чем можно использовать взаимодействие для целей измерения.

6. Измерение спина атома. В качестве примера рассмотрим прежде всего частный случай, когда измеряется z -компонента момента

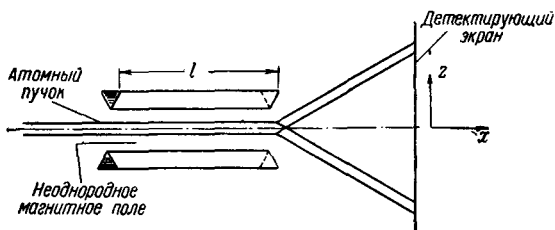


Рис. 116.

количества движения атома, проекция которого равна $\hbar/2$. Исследуемая система S имеет только два возможных состояния, которые мы обозначим соответственно через $s=1$ и $s=-1$. Спин будет измеряться по схеме опыта Штерна — Герлаха, показанной на рис. 116 (см. также гл. 14, п. 16).

Предположим, что отклонение атома неоднородным магнитным полем происходит мгновенно. Это означает, что смещением атома

в направлении оси z в области неоднородного поля можно пренебречь. Тогда сила, действующая со стороны магнитного поля, придает частице импульс, который направлен вверх или вниз в зависимости от того, будет ли спин направлен вверх или вниз. После того, как частица покидает поле, результирующая сила, действующая по оси z , вызывает отклонение, которое зависит от спина. Таким образом, довольно грубое наблюдение положения позволяет нам определить, направлен ли спин вверх или вниз.

Энергия взаимодействия в этой задаче имеет вид *) (см. уравнение (17.78))

$$H_I = \mu (\sigma \mathcal{H}), \quad (22.10a)$$

где

$$\mu = - \frac{e\hbar}{2mc}.$$

В плоскости симметрии, вдоль которой падает пучок, поле направлено по оси z . В первом приближении можно написать $\mathcal{H}_z \cong \mathcal{H}_0 + z \mathcal{H}'_0$, где $\mathcal{H}_0 = (\mathcal{H}_z)_{z=0}$ и $\mathcal{H}'_0 = \left(\frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial z} \right)_{z=0}$. Тогда

$$H_I \cong \mu (\mathcal{H}_0 + z \mathcal{H}'_0) \sigma_z^{**}. \quad (22.10b)$$

В этом случае положение атома z есть координата аппаратуры, так как, определяя z , мы можем найти величину спина. Можно считать, что измерительной аппаратурой является комбинация неоднородного магнитного поля, координаты атома и экрана детектора. Магнитное поле в данном случае вводит связь между атомным спином и координатой аппаратуры.

Прежде чем атом попадает в магнитное поле, необходимо, чтобы он был в совершенно определенном состоянии. В противном случае из этого опыта нельзя будет извлечь никаких заключений о величине σ_z . Примем, что зависимость волновой функции атома от z выражается в виде пакета, который обозначим через $f_0(z)$. Согласно п.3, координата аппаратуры должна быть описываема классически. Следовательно, состояние атома определяется значительно менее точно, чем это допускается соотношением неопределенностей, т. е.

$$\Delta p \Delta z \gg \hbar. \quad (22.11)$$

Заметим, что H_I и σ_z диагональны в одинаковом представлении. Это означает, что в опыте Штерна—Герлаха измеряется компонента

*) Мы предполагаем, что спиновые переменные относятся к нейтральному атому.

**) Строго говоря, поскольку $\frac{\partial \mathcal{H}_y}{\partial y} + \frac{\partial \mathcal{H}_z}{\partial z} = 0$, всегда должна быть неоднородная компонента поля, создающая отклонение по оси y . Так как такое отклонение нас не интересует, то здесь не рассматривается y -компонента поля.

спина σ_z без изменения (при этом σ_x и σ_y изменяются неконтролируемым путем).

Начальная волновая функция системы будет тогда

$$\psi_0 = f_0(z)(c_+v_+ + c_-v_-), \quad (22.12a)$$

где v_+ и v_- — спинорные функции, относящиеся соответственно к $\sigma_z = 1$ и $\sigma_z = -1$, а c_+ и c_- — неизвестные коэффициенты.

Пока имеет место взаимодействие, волновую функцию можно разложить по двум возможным спинорным волновым функциям, причем коэффициенты, как и в уравнении (22.76), будут функциями z и t . Тогда

$$\psi = f_+(z, t)v_+ + f_-(z, t)v_-, \quad (22.126)$$

а уравнение Шрёдингера принимает вид *)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_I \psi$$

или

$$i\hbar \left(\frac{\partial f_+}{\partial t} v_+ + \frac{\partial f_-}{\partial t} v_- \right) = \mu (\mathcal{H}_0 + z\mathcal{H}'_0)(f_+v_+ - f_-v_-). \quad (22.13a)$$

Так как коэффициенты при v_+ и v_- в обеих частях уравнения должны быть по отдельности равны между собой, то

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{\partial f_+(z, t)}{\partial t} &= \mu (\mathcal{H}_0 + z\mathcal{H}'_0) f_+(z, t), \\ i\hbar \frac{\partial f_-(z, t)}{\partial t} &= -\mu (\mathcal{H}_0 + z\mathcal{H}'_0) f_-(z, t). \end{aligned} \right\} \quad (22.136)$$

Начальные условия при $t=0$:

$$f_+ = f_0(z)c_+ \quad \text{и} \quad f_- = f_0(z)c_-. \quad (22.14)$$

Уравнения (22.136) легко интегрируются. Решения, удовлетворяющие правильным начальным условиям, имеют вид

$$f_+ = c_+ f_0(z) e^{-i\mu (\mathcal{H}_0 + z\mathcal{H}'_0)t/\hbar}, \quad f_- = c_- f_0(z) e^{i\mu (\mathcal{H}_0 + z\mathcal{H}'_0)t/\hbar} \quad (22.15a)$$

и

$$\psi = f_0(z) \left[c_+ e^{-i\mu (\mathcal{H}_0 + z\mathcal{H}'_0)t/\hbar} v_+ + c_- e^{i\mu (\mathcal{H}_0 + z\mathcal{H}'_0)t/\hbar} v_- \right]. \quad (22.156)$$

*) Так как взаимодействие мгновенное, то мы пренебрегаем всеми энергиями, кроме энергии взаимодействия H_I (см. уравнение (22.4)). В данном случае мы пренебрегли кинетической энергией движущейся массы атома ($p_z^2/2m$). Сам спин (в нерелятивистской теории) не обладает никакой связанной с ним энергией, кроме энергии взаимодействия с электромагнитным полем.

Мы подошли теперь к задаче определения времени Δt , в течение которого имело место взаимодействие. Это, очевидно, то время, которое частица провела в магнитном поле. Строго говоря, его нельзя определить точно, потому что надо построить волновой пакет по оси x и время, в течение которого этот пакет проходит данную точку, неопределенно в пределах $\delta t \cong \hbar/\Delta E$. Однако если выбрать размер области поля l большой по сравнению с расстоянием между полюсными наконечниками, то ошибка во времени, обусловленная шириной волнового пакета, делается ничтожной. Тогда движение по оси x можно трактовать как классическое и сказать, что поле действует в течение времени $\Delta t = l/v$, где v — скорость по оси x . Так как определение спина не очень чувствительно к точной оценке Δt , то такая процедура достаточна для нашей цели. С другой стороны, движение по оси z , совершенно очевидно связанное со спином энергией $H_I = \mu \sigma_z (\mathcal{H}_0 + z \mathcal{H}'_0)$, должно трактоваться квантовомеханически, потому что мы ищем квантовомеханическое описание того, что происходит в течение измерения.

После того, как частица пройдет через магнитное поле, волновую функцию надо получить из уравнения (22.15б), положив $t = \Delta t = l/v$. Заметим, что v_+ и v_- умножаются на фазовые множители противоположных знаков. Фазовый множитель $e^{-i\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t z / \hbar}$ при v_+ показывает, что если спин положителен, то изменение импульса равно $\delta p_z = -\mathcal{H}'_0 \mu \Delta t$, а множитель $\exp(i\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t z / \hbar)$ при v_- означает, что если спин отрицателен, то частица получает точно противоположный импульс*). Следовательно, в принципе возможно измерить спин по импульсу, переданному частице магнитным полем. Однако в этом опыте удобнее определить импульс косвенно, измеряя расстояние, которое проходит частица за время, необходимое для достижения удаленного экрана. Поэтому надо проследить движение волнового пакета после того, как частица покидает поле. Для этого разлагаем в интеграл Фурье начальный волновой пакет, написав

$$\psi = \int g(k) (v_+ c_+ e^{ikz} + v_- c_- e^{ikz}) dk, \quad (22.16)$$

где $g(k)$ — пакет с центром в $k=0$. Непосредственно после того, как частица покидает поле,

$$\psi = \int g(k) \left\{ c_+ v_+ \exp \left[i \left(k - \frac{\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t}{\hbar} \right) z - i \frac{\mu \mathcal{H}_0 \Delta t}{\hbar} \right] + \right. \\ \left. + c_- v_- \exp \left[i \left(k + \frac{\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t}{\hbar} \right) z + i \frac{\mu \mathcal{H}_0 \Delta t}{\hbar} \right] \right\} dk. \quad (22.17a)$$

*) Заметим, что волновая функция (уравнение (22.15б)) принимает форму пакета, так как она умножается на функцию $f_0(z)$. Однако средний импульс пакета изменяется в соответствии с изменением аргумента экспоненциала.

k -я компонента Фурье части волновой функции с положительным спином будет теперь колебаться с угловой частотой $\omega = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar}{2m} \left(k - \frac{\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t}{\hbar} \right)^2$, а часть с отрицательным спином — с частотой $\omega = \frac{\hbar}{2m} \left(k + \frac{\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t}{\hbar} \right)^2$. Тогда волновая функция имеет вид

$$\psi = \int g(k) \left\{ c_+ v_+ \exp \left[i \left(k - \frac{\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t}{\hbar} \right) z - i \frac{\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t}{\hbar} - \frac{i\hbar t}{2m} \left(k - \frac{\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t}{\hbar} \right)^2 \right] + c_- v_- \exp \left[i \left(k + \frac{\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t}{\hbar} \right) z + i \frac{\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t}{\hbar} - \frac{i\hbar t}{2m} \left(k + \frac{\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t}{\hbar} \right)^2 \right] \right\} dk. \quad (22.176)$$

Центр волнового пакета находится там, где фаза имеет экстремальное значение или где

$$\left. \begin{aligned} z &= -\frac{\mathcal{H}'_0 \mu \Delta t}{\hbar} t && \text{для положительного спина,} \\ z &= \frac{\mathcal{H}'_0 \mu \Delta t}{\hbar} t && \text{для отрицательного спина.} \end{aligned} \right\} \quad (22.18)$$

Таким образом, волновая функция разбивается на два пакета, которые движутся в различных направлениях, в зависимости от того, будет ли спин положителен или отрицателен.

В опыте Штерна—Герлаха возможно измерить спин, если импульс $\delta p = \pm \mu \mathcal{H}'_0 \Delta t$, полученный частицей в магнитном поле, намного больше, чем первоначальная неопределенность Δp_0 импульса пучка. Если это требование не удовлетворяется, то естественное расплывание волнового пакета частицы будет достаточно велико, чтобы замаскировать отклонение, зависящее от спина. Поэтому мы должны потребовать, чтобы выполнялись неравенства

$$\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t \gg \Delta p_0 \quad \text{или} \quad \mathcal{H}'_0 \Delta t \gg \frac{\Delta p_0}{\mu}. \quad (22.19)$$

Таким образом, мы определили минимальное значение произведения $\mathcal{H}'_0 \Delta t$, необходимое, чтобы связь, вносимая измерительной аппаратурой, была достаточно велика для возможности проведения точного измерения. При идеальных условиях $\Delta p_0 \cong \hbar/\Delta x$, где Δx — ширина пакета. Однако мы видели, что на практике пакет всегда значительно шире (в пространстве импульсов), чем минимальная ширина, допускаемая для данного Δx соотношением неопределенностей.

После того, как пакет покидает магнитное поле, он начинает расплываться. Минимальная ширина пакета, конечно, ограничена соотношением неопределенностей, но в любом случае пакет расплывается по крайней мере до величины

$$\Delta z = \frac{\Delta p_0 t}{m}$$

за то время, пока он достигнет экрана-детектора (о расплывании волновых пакетов см. гл. 3, п. 5 и гл. 10, п. 8). Это расплывание будет добавляться к первоначальной ширине пакета, когда он проходит между полюсами магнита. Но если удовлетворено условие (22.19), то среднее расстояние, проходимое каждым пакетом (см. уравнения (22.18)), будет гораздо больше, чем флуктуации, возникающие на этом расстоянии, поэтому первоначальное отсутствие полной определенности ширины пучка не может явиться препятствием для получения достаточно точных измерений спина.

На рис. 117 показана общая форма пакетов в пространстве импульсов и в пространстве координат, когда частица достигает экрана-детектора.

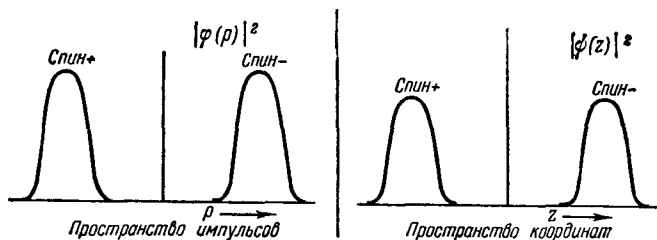


Рис. 117.

Теперь ясно, что даже если положение и импульс пучка определены только с классической степенью точности, то всегда можно сделать произведение $\mathcal{H}'_0 \Delta t$ настолько большим, что получается классически описываемое разделение между пучками соответственно для положительных и отрицательных спинов. Итак, мы достигли нашей цели и свели теорию измерения спина к описанию соотношения между состоянием исследуемой квантовой системы и состоянием классически описываемой части измерительной аппаратуры.

7. Обобщение на случай переменных, обладающих произвольно большим числом собственных значений. Можно довольно просто обобщить полученный в п. 6 результат на случай переменных, имеющих произвольно большое число собственных значений. Мы видим из уравнения (22.9), что волновая функция аппаратуры претерпевает изменение, которое зависит от квантового состояния r

исследуемой системы. Если надо получить достаточно точные результаты наблюдения, то взаимодействие между аппаратурой и исследуемой системой должно быть настолько сильным, что соседние квантовые числа r исследуемой системы приводят к классически различимым состояниям аппаратуры, т. е. к волновым функциям аппаратуры, разделенным многими квантовыми состояниями. Мы увидим, что в принципе всегда возможно достичь этого результата, сделав произведение силы взаимодействия на время, в течение которого она действует, достаточно большим.

Начнем с уравнения (22.9). Заметим прежде всего, что в частном случае, когда $H_I(r, y)$ диагонально в том же самом представлении, в котором и y диагонально (т. е. H_I является функцией только y и не содержит операторов вида d/dy), уравнение (22.9) легко интегрируется. Пользуемся начальным условием, что при $t=0$ волновая функция системы S равна $\sum_r c_r v_r(x)$ см. уравнение (22.2)), а волновая функция аппаратуры имеет вид $f_0(y)^*$, поэтому полная волновая функция равна $\psi_0 = f_0(y) \sum_r c_r v_r(x)$. Тогда уравнение (22.9) дает

$$f_r(y, t) = c_r f_0(y) e^{-iH_I(r, y) t/\hbar}. \quad (22.20)$$

Это является обобщением уравнений (22.15), где, как мы отмечали, H_I было также только функцией z .

Если H_I недиагонально в том же представлении, в котором диагонально y , то можно всегда произвести унитарное преобразование к представлению, в котором H_I диагонально (это возможно всегда, когда H_I — эрмитовский оператор). После того, как преобразование выполнено, мы можем интегрировать уравнение Шрёдингера, как это делалось выше, а затем провести обратное унитарное преобразование к первоначальным переменным. Однако ниже мы ограничимся случаем, когда H_I диагонально в том же представлении, что и y , учитывая возможность легко обобщить рассматриваемый случай описанным выше приемом.

Вспомним, что квантовое число данного квантового состояния равно числу узлов волновой функции для этого состояния. Так как множитель $f_0(y)$ общий для всех волновых функций $f_r(y, t)$ в уравнении (22.20), то ясно, что различие в числе гармоник для различных значений r зависит только от множителя

$$e^{-iH_I(r, y) t/\hbar} = \cos \left[H_I(r, y) \frac{t}{\hbar} \right] - i \sin \left[H_I(r, y) \frac{t}{\hbar} \right].$$

*) Мы рассматриваем здесь только случай мгновенного измерения, поэтому волновая функция аппаратуры $f_0(y)$ действительно постоянная.

Вещественная часть $e^{-iH_I(r, y) t/\hbar}$ будет иметь узел*) каждый раз, когда

$$H_I(r, y) \frac{t}{\hbar} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi,$$

где n — целое число. Однако волновая функция имеет заметное значение только в ограниченной области Δy , в которой значительна величина $f_0(y)$. Внутри этой области можно обычно ограничиться для H_I первыми двумя членами степенного ряда:

$$H_I(r, y) = H_0(r) + yH'_0(r) + \dots, \quad (22.21a)$$

где

$$H_0(r) = H_I(0, r) \quad \text{и} \quad H'_0(r) = \left[\frac{\partial}{\partial y} H_I(y, r) \right]_{y=0}.$$

В той области, в которой волновая функция значительна, разность в числе узлов для соседних величин r будет по порядку величины равна

$$\Delta n = \frac{\Delta y}{\pi} \frac{t}{\hbar} [H'_0(r+1) - H'_0(r)]. \quad (22.21б)$$

Ясно, что если разность $[H'_0(r+1) - H'_0(r)] t/\hbar$ сделать достаточно большой, то Δn может быть произвольно большой величиной. В частности, Δn можно сделать столь большой, что соседние квантовые состояния r системы S приведут к классически описываемым состояниям аппаратуры.

Интересно заметить, что если измерения были сделаны достаточно хорошо, то волновые функции измерительной аппаратуры, соответствующие различным значениям r , будут приближенно ортогональны. Чтобы показать это, рассмотрим интеграл

$$\int f_0^*(y) e^{iH_I(r, y) t/\hbar} f_0(y) e^{-iH_I(r-1, y) t/\hbar} dy. \quad (22.22a)$$

Этот интеграл входит в определение ортогональности волновых функций измерительной аппаратуры, соответствующих соседним квантовым состояниям системы S . Интеграл приближенно равен следующему выражению:

$$\int f_0^*(y) f_0(y) e^{i \frac{yt}{\hbar} [H'_0(r) - H'_0(r-1)]} e^{-\frac{it}{\hbar} [H_0(r) - H_0(r-1)]} dy. \quad (22.22б)$$

Функция $f_0^*(y) f_0(y)$ похожа на волновой пакет. Интеграл ортогональности как раз представляет компоненту Фурье при $|f_0(y)|^2$, соответствующую $k = [H'_0(r) - H'_0(r-1)] t/\hbar$. Эта компонента

*) См. гл. 11, п. 12. Квантовое число комплексной функции равно числу узлов ее вещественной части.

Фурье будет велика только в ограниченной области $\Delta k \cong 1/\Delta y$. Но, согласно уравнению (22.21б), если только было произведено достаточно точное измерение, получаем

$$\Delta n = [H'_0(r) - H'_0(r-1)] \frac{t}{h} \Delta y \gg 1. \quad (22.22в)$$

Следовательно, если взаимодействие достаточно сильно, чтобы обеспечить точное измерение, то $k \gg \Delta k$, поэтому компонента Фурье $|f_0(y)|^2$, соответствующая k , будет очень мала. Это означает, что волновые функции аппаратуры, соответствующие соседним значениям r , очень близки к ортогональным*).

В качестве примера рассмотрим спиновую волновую функцию. В п. 6 было показано, что если сделано достаточно точное измерение спина, то волновой пакет, соответствующий $s = +1$, настолько далек от волнового пакета, соответствующего $s = -1$, что они нигде заметно не перекрываются. В результате подынтегральная функция интеграла $\int f_+^*(z) f_-(z) dz$ повсюду очень мала, и поэтому очень мал сам интеграл.

8. Разрушение интерференционной картины в процессе измерения. Мы подходим теперь к основной проблеме, возникающей при доказательстве логической последовательности квантовой теории измерений, а именно к явлению разрушения интерференционной картины, которое имеет место в процессе измерения. В гл. 6, п. 3 и гл. 10, п. 36 мы установили, что, когда бы ни проводилось измерение какой-либо наблюдаемой величины, взаимодействие между исследуемой системой и измерительной аппаратурой всегда приводит к умножению каждой части волновой функции, соответствующей определенному значению A , на случайный фазовый множитель e^{ia} . Следовательно, если волновая функция перед измерением была равна $\sum_a c_a \psi_a(x)$, то она превращается в $\sum_a c_a e^{ia} \psi_a(x)$. Случайные фазовые множители обуславливают разрушение интерференционной картины между различными $\psi_a(x)$. Как было показано в гл. 6, п. 4, если при таких обстоятельствах интерференционная картина не разрушается, то можно показать, что квантовая теория приводит к абсурдным результатам. Поэтому доказательство того, что интерференционная картина действительно разрушается, существенно для последовательности самой теории.

При рассмотрении этого вопроса мы ограничимся частным случаем измерения z -компоненты спина, но метод доказательства может

*) Если соседние волновые функции почти ортогональны, то ясно, что волновые функции, соответствующие весьма различным значениям, будут еще более близки к ортогональным.

быть без труда распространен и на общий случай. Прежде всего заметим, что после измерения волновые функции спина и измерительной аппаратуры (т. е. координата частицы) очень тесно связаны, как это следует, например, из уравнений (22.15). Однако очень часто желательно знать среднее значение некоторой функции спина, не интересуясь при этом состоянием измерительной аппаратуры. Для получения этого значения нужно провести усреднение по всем возможным состояниям переменных аппаратуры. Чтобы получить среднее значение произвольной функции спина, нужно вычислить следующее выражение:

$$\overline{g(\sigma)} = \int [f_+^*(z)v_+^* + f_-^*(z)v_-^*] g(\sigma) [f_+(z)v_+ + f_-(z)v_-] dz, \quad (22.23a)$$

где f_+ и f_- определены из уравнений (22.15), или

$$\begin{aligned} \overline{g(\sigma)} = & \int |f_+(z)|^2 v_+^* g(\sigma) v_+ dz + \int |f_-(z)|^2 v_-^* g(\sigma) v_- dz + \\ & + \int f_+^*(z) f_-(z) v_+^* g(\sigma) v_- dz + \int f_-^*(z) f_+(z) v_-^* g(\sigma) v_+ dz. \end{aligned} \quad (22.23б)$$

Но $\int |f_+(z)|^2 dz$ как раз равен полной вероятности того, что частица находится в волновом пакете, соответствующем спину $\hbar/2$, а $\int |f_-(z)|^2 dz$ — вероятность того, что она находится в пакете, соответствующем спину $-\hbar/2$. Тогда сумма двух первых членов равна

$$P_+ \overline{g_+(\sigma)} + P_- \overline{g_-(\sigma)}, \quad (22.23в)$$

где P_+ и P_- — соответственно вероятности того, что спин равен $\hbar/2$ и $-\hbar/2$, а $\overline{g_+(\sigma)}$ и $\overline{g_-(\sigma)}$ — соответственно средние значения $g(\sigma)$, когда спин равен $\hbar/2$ и $-\hbar/2$. Выражение (22.23в) можно назвать «классическим» слагаемым в формуле для среднего значения, так как оно как раз равно величине, которая должна была бы получиться в классической системе, где вероятности положительного и отрицательного спинов соответственно равны P_+ и P_- .

Третий и четвертый члены в уравнении (22.23б) являются специфически квантовомеханическими интерференционными членами. Как показано в п. 6, если только было сделано достаточно точное измерение, разделение между центрами пакетов $f_+(z)$ и $f_-(z)$ намного больше, чем ширина этих пакетов. Это значит, что произведение $f_+(z)f_-(z)$ всегда очень мало, так что практически вся величина $g(\sigma)$ обусловлена «классическими» членами в уравнении (22.23б). Если речь идет о среднем значении любой функции спина, то специфически квантовомеханические интерференционные члены между v_+

и v_- отсутствуют после измерения, которое достаточно точно определяет величины z -компоненты спина.

9. Появление случайных фазовых множителей. Другой путь описания явления разрушения интерференции состоит в использовании понятия случайных фазовых множителей, уже упоминавшихся в п. 8 этой главы и в гл. 6, п. 3. Для получения формулировки этих понятий заметим, что в уравнении (22.156) v_+ и v_- умножаются на величины, зависящие от z . В области Δz , где волновые функции имеют заметную величину, каждый из этих множителей изменяется на величину $e^{i\alpha}$, где $\alpha \cong \frac{\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t}{\hbar} \Delta z$. Но из уравнения (22.19) мы видим, что если $\mathcal{H}'_0 \Delta t$ — достаточно большая величина, обеспечивающая точное измерение, то

$$\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t / \Delta p \gg 1.$$

Так как для классического измерения $\Delta z \gg \hbar / \Delta p$, то

$$\frac{\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t \Delta z}{\hbar} \gg \frac{\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t}{\Delta p} \gg 1. \quad (22.24)$$

Таким образом, фаза каждой волновой функции изменяется на число, значительно большее чем 2π , в области, в которой $f_0(z)$ имеет значительную величину. Заметим теперь, что, *пока речь идет о задаче вычисления средних функций только одного спина*, мы можем рассматривать z -компоненту аппаратуры как параметр, от которого зависят коэффициенты спиновой волновой функции. От одного измерения до следующего классически описываемое положение координаты аппаратуры будет флуктуировать по всей области доступных значений. Следовательно, будет случайная флуктуация по всем возможным значениям фазовых множителей $e^{i\alpha_+}$ и $e^{i\alpha_-}$, умноженная соответственно на v_+ и v_- . Далее, отношение этих фазовых множителей равно

$$\frac{c_+}{c_-} e^{-2i\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t / \hbar} e^{-2i\mu \mathcal{H}'_0 \Delta t z / \hbar}. \quad (22.25)$$

Поэтому фазовые множители $e^{i\alpha_+}$ и $e^{i\alpha_-}$ совершенно не связаны друг с другом, а также с величиной спина. Таким путем мы подтвердили высказывание об эффекте разрушения интерференции, сделанное в гл. 6, п. 3 и в гл. 10, п. 36.

Несколько численных оценок могут оказаться полезными, чтобы показать, насколько большое фазовое смещение фактически осуществляется в типичном эксперименте. Предположим, что мы имеем дело с напряженностью магнитного поля порядка 1000 эрст; пусть градиент магнитного поля — 10 000 эрст/см, длина магнитных

полюсов — 10 см , обычная скорость для атомов равна 10^4 см/сек . Тогда по истечении времени $\Delta t = l/v = 10^{-3}\text{ сек}$ мы получим для отношения фазовых множителей из уравнения (22.25) (полагая $c_+/c_- = 1$ и $e/mc = 10^7$)

$$e^{-10^5 i} e^{-10^5 i z}.$$

Мы видим, что фаза действительно меняется на очень большое число.

10. Интерпретация полной волновой функции с помощью статистического ансамбля волновых функций только одного спина. После того, как спин уже взаимодействовал с измерительной аппаратурой, которая определяет его величину, ясно, что уже нет отдельной волновой функции, принадлежащей только спину, а вместо этого появляется полная волновая функция, в которой координаты спина и измерительной аппаратуры связаны сложным образом. Но несмотря на это существует способ правильной интерпретации волновой функции всей сложной системы с помощью статистического ансамбля волновых функций только спина *).

Для этой интерпретации мы воспользуемся результатами п. 8: после измерения величины σ_z интерференционные члены между спиновыми волновыми функциями v_+ и v_- не могут уже более ничего добавить к среднему значению любой функции спина. Следовательно, при определении средних значений функций только спина можно пренебречь координатами аппаратуры и вместо этого предположить, что спиновая волновая функция целиком равна или v_+ , или v_- , а вероятности того, что каждая из этих функций действительно является точной, соответственно равны $|a_+|^2$ и $|a_-|^2$ (спиновая волновая функция перед проведением измерения равна $a_+v_+ + a_-v_-$). Таким образом, мы заменили действительную волновую функцию сложной системы статистическим ансамблем отдельных волновых функций, соответствующих условиям, в которых волновая функция одного спина равна или v_+ , или v_- .

Однако следует заметить, что статистический ансамбль волновых функций одного спина является идеализацией, которая дает правильные средние значения функций σ , если только взаимодействие между спином и измерительной аппаратурой создает полную волновую функцию, нарушая интерференцию между различными собственными функциями спина. Если бы, например, произведение $\mathcal{H}'_0 \Delta t$, входящее в уравнение (22.24), было слишком мало, чтобы обеспечить достаточно точное измерение, то волновые пакеты, соответствующие

*) Этот способ по существу тот же самый, что и изложенный в гл. 6, п. 4, но мы дадим здесь другую трактовку, которая частично повторяет прежнюю, но является несколько более общей.

положительному и отрицательному спинам, должны были бы перекрыться так, чтобы произведения $f_+(z)f_-(z)$ не равнялись нулю, а интерференционные члены поэтому добавлялись бы к средним величинам функций спина. Тогда уже нельзя было бы больше получать средние значения, предполагая, что волновая функция равна или целиком ψ_+ , или целиком ψ_- .

Способ замены волновой функции сложной системы статистическим ансамблем волновых функций одного спина позволяет интерпретировать результаты опыта более привычным путем, при котором выявляется один определенный результат из всех логически возможных результатов, исключающих друг друга. Таким образом, после воздействия измерительной аппаратуры на систему, но до обнаружения наблюдателем результатов этого воздействия, система обладает тем же средним значением произвольной функции спина, которое она имела бы, находясь в одном из двух спиновых состояний с соответствующей вероятностью $|a_+|^2$ или $|a_-|^2$. По показаниям аппаратуры наблюдатель обнаруживает действительное состояние системы, определяя, в каком из двух возможных классически различимых состояний находится измерительная аппаратура. При этом он считает возможным заменить статистический ансамбль волновых функций единственной волновой функцией, соответствующей действительно наблюдаемому значению спина. Внезапная замена статистических ансамблей волновых функций единственной волновой функцией не вызывает никаких изменений в состоянии спина. Она аналогична внезапному изменению классических функций вероятности, которое является следствием уточнения информации наблюдателя (см. гл. 6, п. 4). Такое внезапное изменение волновой функции не имеет прямого физического смысла, потому что различные члены статистического ансамбля волновых функций не могут интерферировать друг с другом. (Если бы такое внезапное изменение волновой функции произошло, когда еще существуют определенные фазовые связи, то, как показано в гл. 6, п. 4, квантовая теория потеряла бы весь смысл.)

Иногда говорят, что статистический ансамбль волновых функций одного спина, который заменяет полную волновую функцию спина и измерительной аппаратуры, определяет «смешанное состояние» спина в противоположность «чистому состоянию», в котором спиновая волновая функция вполне определена. Такая терминология до некоторой степени вводит в заблуждение, потому что уже введенный термин «квантовое состояние» соответствует положению, когда много различных частей волновых функций определенным образом интерферируют; таким образом, некоторые свойства системы являются общими, или «интерференционными», свойствами различных составляющих ее частей. Это означает, что если кто-либо захочет понять все свойства такой системы, то он не сможет представить ее состоящей из простой суммы более мелких «подсостояний». С другой стороны, при статистическом ансамбле волновых функций не может произойти такой интерференции между различными компонентами волновых функций. Более того,

коль скоро наблюдатель посмотрит на измерительную аппаратуру, спин переходит из «смешанного» состояния в «чистое» состояние. Нам представляется неразумным пользоваться терминологией, отражающей, что спин изменяет свое состояние (из смешанного в чистое) в таких условиях, когда фактически ничего не изменяется, за исключением информации наблюдателя о спине. Термин «статистический ансамбль состояний» имеет более точный смысл.

11. Включение координат аппаратуры. Предыдущее обсуждение показывает, что при вычислении любой функции одного только спина отсутствует интерференция между различными собственными функциями σ_z после того, как электрон уже взаимодействовал с измерительной аппаратурой, определяющей z -компоненту его спина. Но очевидно, что те же выводы справедливы и для произвольной функции от координат спина и измерительной аппаратуры $f(z, s)$. Действительно, полная волновая функция спина и измерительной аппаратуры является чистой волновой функцией, поэтому на первый взгляд можно ожидать, что интерференция играет существенную роль при вычислении средних значений функций типа $f(z, s)$.

Рассмотрим, например, опыт Штерна — Герлаха. Одним из способов обнаружения интерференционных эффектов между двумя пучками для полной системы явилась бы такая установка для магнитных полей, которая соединяет два пакета вместе после того, как они были разъединены. Схематически такая установка показана на рис. 118. Если однородные магнитные поля, показанные на схеме,

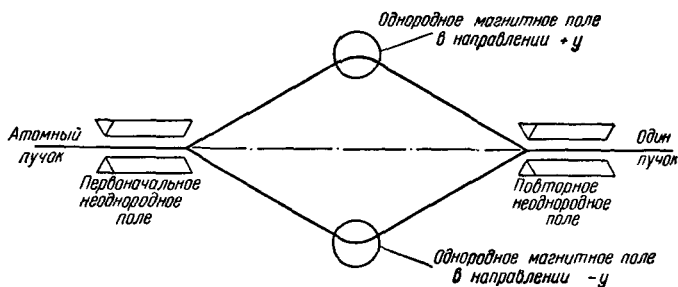


Рис. 118.

помещены точно в нужных местах и если второе неоднородное поле является точным повторением первого, то два волновых пакета можно соединить в один когерентный пакет. Хотя точность, которая требуется для достижения этого результата, должна быть фантастической, но в принципе она достижима. Таким путем, пользуясь измерительной аппаратурой, которая при своем действии зависит одновременно от z и σ , мы можем использовать интерференцию, существующую между двумя пакетами. Будет ли конечный пучок

иметь определенный спин в направлении осей x , или y , или z , целиком зависит от относительных фаз, с которыми соединяются два пучка. Например, если спиновая волновая функция будет $(v_+ + v_-)/\sqrt{2}$, то результирующий спин должен быть направлен по оси $+x$ (см. уравнения (17.25)).

Если бы оказалось возможным пользоваться измерительной аппаратурой таким образом, чтобы одновременно измерялась величина спина в направлении оси z и допускалось соединение пучков опять с когерентной интерференцией, то отсюда бы следовали абсурдные результаты. Ведь каждый раз, когда измеряется z -компонента спина, должен получаться определенный результат, а именно $\hbar/2$ или $-\hbar/2$. Если, например, получено значение $\hbar/2$, то отсюда немедленно можно заключить, что данный атом был в верхнем пучке, поэтому волновая функция для нижнего пучка должна быть равна нулю. В следующем опыте может быть получен определенный результат $-\hbar/2$, приводящий к нулевому значению для волновой функции верхнего пучка. Во всех случаях, когда существует какая-нибудь интерференция между спиновыми волновыми функциями v_+ и v_- , после воздействия аппаратуры, допускающего измерение спина, эта интерференция должна нарушаться в момент, когда наблюдатель начинает уяснять результаты действия своей аппаратуры. Но многие свойства действительного поведения вещества зависят от интерференционных свойств различных частей волновой функции. Следовательно, если бы интерференция между v_+ и v_- не нарушалась от действия измерительной аппаратуры, то вообще нельзя было бы объективно описать вселенную, так как поведение вещества в большой степени зависело бы тогда от того, ознакомился ли наблюдатель с поведением электрона (в этой связи см. гл. 6, п. 4).

Чтобы убедиться в действительном нарушении интерференции для рассматриваемого случая, т. е. при измерении z -компоненты спина, надо только заметить, что для измерения этой величины надо измерить координату атома перед тем, как два пучка опять соединятся в один. Но легко показать из соотношения неопределенностей (см., например, гл. 6, п. 2), что возмущение, обусловленное этим измерением, будет действительно нарушать интерференцию. Следовательно, интерференция в полной волновой функции спина и измерительной аппаратуры в принципе возможна только тогда, когда сама измерительная аппаратура не находится под наблюдением при помощи какой-нибудь другой аппаратуры.

Мы можем включить только что развитые общие понятия в представление смешанных волновых функций, сказав, что после того, как наблюдалась z -координата атома, полная волновая функция включает координаты трех систем, а именно: атомного спина, координаты атома и координаты установки, измеряющей z -координату атома. После действия второй измерительной аппаратуры система,

содержащая спин и z -координату атома, может быть определена приближенно через ансамбль волновых функций, потому что должна нарушаться интерференция между различными значениями σ и z . Следовательно, даже функции типа $f(z, \sigma)$ могут быть теперь вычислены в предположении, что σ_z равна или $+1$, или -1 .

Можно убедиться, что таким путем трудности исследуемой проблемы лишь переносятся на другую стадию, так как тройная система все еще имеет чистую волновую функцию и потому может, в принципе, обнаруживать эффекты интерференции. Следовательно, если наблюдается и третья система или при помощи совсем другого типа измерительной аппаратуры, или путем наблюдений человеком, то мы еще раз получаем ансамбли волновых функций для тройной системы, но полная волновая функция, включающая наблюдателя, если он каким-нибудь образом взаимодействует с системой, все еще является чистой волновой функцией.

Можно ли, в конце концов, как-нибудь обойти эту трудность или необходимо заключить, что анализ всегда будет неполным? Мы увидим, что эта проблема может быть решена, не доводя анализа до той стадии, в которой измерительная аппаратура взаимодействует с наблюдателем. Пусть опыт поставлен так, что аппаратура действует совершенно автоматически, т. е. результаты опыта регистрируются каким-нибудь подходящим устройством, например, на фотопластинке. Предположим, что вся система, содержащая спин, z -координату атома, аппаратуру, измеряющую z -координату, и аппаратуру, регистрирующую результаты этих измерений, обладает некоторой чистой волновой функцией в начале эксперимента. (Нет необходимости, чтобы исследователь точно знал, какая это функция.) После взаимодействия сложная волновая функция перейдет в некоторую другую чистую волновую функцию. Мы хотим здесь показать, что хотя конечная волновая функция действительно чистая, но фазовые соотношения между различными частями волновой функции, соответствующие различным значениям σ_z , настолько сложны, что в высшей степени невероятна заметная зависимость какого-нибудь физического процесса теперь или в будущем от такой интерференции. Следовательно, если дать системе возможность действовать самой по себе без вмешательства наблюдателя, то она переходит в состояние, в котором с подавляющей вероятностью физические результаты будут те же самые, как если бы спин был в одном из статистических ансамблей состояний. Когда наблюдатель взаимодействует с аппаратурой, то система попадает в подлинный статистический ансамбль состояний. Однако нарушение определенных фазовых соотношений, входящих в этот процесс, не приводит к существенным различиям в поведении системы, потому что уже ничтожно малы эффекты интерференции между волновыми функциями, соответствующими различным значениям наблюдаемых величин. Следовательно, мы способны получить

полностью объективное описание процесса измерения, которое никак не включает наблюдателя *).

Покажем теперь на примере опыта Штерна — Герлаха, что интерференция фактически нарушается после воздействия измерительной аппаратуры, когда становится возможным измерение. Согласно уравнениям (22.18) и (22.19), для достаточно точного измерения произведение $\hbar_0 \Delta t$ должно быть настолько велико, чтобы два пучка классически заметно разделились. Как показано в п. 9, при этих условиях относительная разность фаз у волновых функций, умноженных на v_+ и v_- , действительно будет очень велика. Хотя в принципе с помощью измерительной аппаратуры, изображенной на рис. 118, возможно соединить оба пучка, но они соединяются с относительными фазами, которые весьма чувствительны к точности конструкции измерительной аппаратуры. Малейшая ошибка или отсутствие воспроизводимости в работе измерительной аппаратуры значительно изменит относительную фазу, а следовательно, изменит результирующее направление спина атома после соединения пучков. Если положение частицы наблюдать при помощи какой-нибудь другой измерительной аппаратуры, то эти фазовые соотношения будут зависеть от состояния этой добавочной аппаратуры. Но до того, как часть аппаратуры может считаться пригодной для наблюдений, необходимо, чтобы на последней стадии измерения полученные результаты были макроскопического порядка величины. Столь большой объект имеет много сложных степеней свободы, и практически невозможно осуществить движение любой из этих степеней свободы вне связи со всеми другими. Такие связанные явления осуществляются, помимо других случаев, при трении, когда, например, движение оси стрелки амперметра может возбуждать очень сложные внутренние тепловые движения молекул оси и подшипников. Можно уверенно сказать, что не существует ни одного макроскопического объекта, который бы в некоторой степени не был свободен от этого. Каждая

*) Трактовка, данная в этой главе, демонстрирует объективность процесса измерения при помощи по существу пространственно-временного описания, проводимого в терминах волновой функции (см. гл. 8, пп. 14 и 15). Однако те же результаты были получены в п. 3 при помощи причинного описания, т. е. описания в терминах неисключаемых и дискретных квантовых переходов от наблюдателя к измерительной аппаратуре. В этом случае указывалось, что классически описываемые стадии измерительной аппаратуры можно адекватно считать существующими отдельно, так как исключаемые квантовые переходы слишком малы, чтобы играть существенную роль. В описании при помощи волновой функции мы приходим к тем же выводам, предполагая, что смещения фаз, возникающие, когда наблюдатель смотрит на классически описываемую часть аппаратуры, также не вносят заметных изменений. Наконец, заметим, что причинные факторы (т. е. импульсы) всегда входят в пространственно-временное описание через фазы волновой функции. Следовательно, эти два метода дают взаимно дополняющие описания одного и того же процесса.

из этих новых степеней свободы должна создавать новые сложные сдвиги фаз в полной волновой функции для всей системы. Так как система работает как классическое тело, то сдвиги фаз должны быть все ббльшие (как это было и на первых стадиях работы измерительной аппаратуры в опыте Штерна — Герлаха) и должны быть очень чувствительны к тому, что происходит со всеми этими координатами.

Для того чтобы добиться интерференции пучков, необходимо тщательно регулировать в фазе долю от каждой из этих степеней свободы. В конце концов, требования для получения определенных интерференционных полос становятся настолько сложными и трудно контролируемыми, что поэтому совершенно невероятно, чтобы случайно или преднамеренно такая интерференция когда-нибудь играла роль в любом физическом процессе. Когда такая стадия достигнута, то можно сказать, что во всех отношениях система действует так, как если бы целиком нарушалась интерференция между собственными функциями измеренных переменных.

12. Необратимость процесса измерения и фундаментальная роль этого явления в квантовой теории. Из предыдущего следует необратимость процесса измерения в том смысле, что, после того как он произошел, совершенно невероятно восстановление определенных фазовых соотношений между собственными функциями измеряемых переменных. Эта необратимость очень напоминает то, что происходит в термодинамических процессах, где уменьшение энтропии также совершенно невероятно *).

Так как необратимое поведение измерительной аппаратуры существенно для нарушения определенных фазовых соотношений и так

*) В действительности между энтропией и процессом измерения существует тесная связь [64]. Необходимость такой связи можно видеть, рассматривая ящик, разделенный перегородкой на две равные части, причем в каждой части содержится равное число молекул газа. Предположим, что в ящике помещена установка, которая может обеспечить грубое измерение координат каждого атома, когда он приближается к перегородке. Эта установка автоматически связана с заслонкой в перегородке таким образом, что заслонка открывается, если молекула приближается к ней справа, и закрывается, если она приближается слева. Таким образом, через некоторое время все молекулы могут собраться в левой части ящика. При этом энтропия газа падает. Если нет механизма, компенсирующего возрастание энтропии, то получается нарушение второго закона термодинамики. Однако на практике каждый процесс, который может обеспечить определенное измерение, обнаруживающее, в какой части ящика находится в действительности молекула, должен также сопровождаться необратимыми изменениями в измерительной аппаратуре. Действительно, можно показать, что эти изменения по крайней мере должны компенсировать уменьшение энтропии газа. Следовательно, второй закон термодинамики не может в действительности быть нарушен указанным выше образом, т. е. знаменитый максвелловский «демон» не может действовать, если он сделан из вещества, подчиняющегося законам физики [65].

как в свою очередь нарушение определенных фазовых соотношений существенно для непротиворечивости квантовой теории в целом, то отсюда следует, что термодинамическая необратимость входит в квантовую теорию интегральным образом. Это совсем не похоже на классическую теорию, где понятие термодинамической необратимости не играет фундаментальной роли в основных дисциплинах — механике и электродинамике. Таким образом, в классической теории основные переменные (такие, как координата или импульс элементарной частицы) обладают определенными значениями независимо от того, обратима или нет измерительная аппаратура. В квантовой же теории эти переменные могут принимать точно определенные значения только тогда, когда система неразрывно связана с классически описываемой системой, претерпевающей необратимые изменения. Поэтому само определение понятия какой-либо системы в микроскопическом смысле требует, чтобы вещество в больших масштабах претерпевало необратимые процессы. Здесь имеется большая аналогия с поведением биологических систем, где также само существование основных элементов (например, клеток) зависит от поддержания необратимых процессов, включающих окисление пищи в организме как целом *) (прекращение этих процессов привело бы к растворению клетки).

13. Волновые и корпускулярные свойства вещества как потенциальные возможности. В гл. 6, п. 13 и в гл. 8, п. 24 было показано, что вещество ведет себя как нечто обладающее свойствами, частично зависящими от того, как неделимый квант связан со своим окружением. Поэтому вопрос о том, будет ли данный объект, например электрон, действовать в большей степени как волна или как частица, не целиком определяется самим электроном, а зависит частично и от окружения электрона.

Мы видели, например, что электрон, взаимодействуя с аппаратурой, измеряющей его координату, создает в ней классически измеряемое состояние, эквивалентное тому, которое создавала бы классическая частица, локализованная в малой области. С другой стороны, электрон, взаимодействуя с аппаратурой (например, с дифракционной решеткой), измеряющей импульс, отражается под классически определяемым углом, почти так же, как если бы он был классической волной. Следовательно, электрон можно рассматривать как некое реально существующее материальное образование, которое обладает потенциальными возможностями для развития своей корпускулярной или волновой формы в зависимости от вещества, взаимодействующего с ним.

*) В этой связи см. последний пункт в гл. 23 и примечание там же. Сравните также общее понятие о связи между микро- и макросвойствами вещества, развиваемое в гл. 23, с проводимыми здесь рассуждениями.

Квантовомеханическая система может создать классически описываемые эффекты не только в измерительной аппаратуре, но также в системах, которые в действительности могут и не использоваться для целей измерений (см. гл. 6, п. 10). Таким образом, при всех обстоятельствах мы изображаем электрон как нечто по природе не очень определенное, но беспрестанно создающее эффекты, которые независимо от того, наблюдаемы ли они фактически или нет, требуют такого объяснения, что электрон обладает свойствами, изменяющимися в зависимости от свойств окружающей среды. Только поскольку электрон способен приводить к классически описываемым результатам, можно приписать ему какую-то определенную модель, но так как результаты, которые он может вызвать, настолько различны, то в разные моменты необходимы взаимно дополнительные модели волны или частицы.

14. О связи между непрерывностью и дискретностью квантовых представлений. Мы готовы теперь к тому, чтобы дать качественную картину одной из наиболее загадочных черт квантовых процессов, а именно перехода системы с одного дискретного энергетического уровня на другой. При таком переходе энергия изменяется скачком, а волновая функция при этом непрерывно деформируется из области пространства, связанного с одной орбитой, в область пространства, связанного с другой орбитой. Чтобы понять такой дуализм свойств, обратимся опять к гл. 6, пп. 9 и 13, где показано, что на квантовом уровне точности свойства данного предмета не существуют отдельно в самом предмете, а являются потенциальными возможностями, проявляющимися тем или иным образом в зависимости от системы, с которой предмет взаимодействует. В частности, энергия электрона и его положение представляют собой противоположные потенциальные возможности, каждая из которых может быть развита до определенного значения только в зависимости от определенности другой. Предположим, что электрон появляется с определенной энергией E . Его положение неопределенно, и он расплывается по всему волновому пакету, но он обладает скрытой возможностью принять более определенное значение. Действительно, если электрон взаимодействует с падающим квантом света, то через короткое время он реализует свою потенциальную возможность для получения более определенного положения, причем он одновременно расплывается по области энергий. В течение этого времени электрон перемещается в другую область пространства, связанную с другой орбитой с большей энергией. При этом он начинает терять свое определенное положение и опять начинает реализовывать свои потенциальные возможности для получения определенной энергии. Это произойдет, когда нарушится фазовое соотношение между состояниями с определенной энергией, так что система действует, вконец концов, во всех отношениях, как если бы она нахо-

дилась в каком-нибудь одном из энергетических состояний. В какое из этих состояний попадет система, нельзя в общем случае полностью предсказать, зная состояние системы перед взаимодействием, хотя общая статистическая тенденция перехода и может быть предсказана *).

Следовательно, в процессе перехода потенциальные возможности, связанные с электроном, изменяются непрерывно, а дискретны формы (т. е. определенные собственные значения энергии), в которых эти потенциальные возможности могут быть реализованы. Поэтому описание квантового процесса как скачкообразного перехода частично является следствием неадекватности нашей обычной терминологии, которая не может ясно выразить того факта, что свойства электрона всегда частично возможны и не полностью определены. Таким образом, когда мы говорим, что электрон имеет определенную энергию в *данный момент времени*, то привычное употребление терминов подразумевает, что электрон *во всякий момент времени* является объектом с определенной энергией, поэтому непрерывный переход может лишь содержать постепенное изменение величины этой энергии. Однако так как электрон обладает скрытой возможностью превращения в нечто обладающее более определенным положением и менее определенной энергией, то переход в известном смысле и непрерывен, хотя электрон не проходит через состояние со всеми промежуточными определенными значениями энергии **).

Непрерывное изменение потенциальных возможностей и дискретные формы, в которые эти возможности могут реализоваться, являются в действительности противоположными, но взаимно дополнительными свойствами электрона, каждое из которых выражает одинаково важные формы поведения электрона (см. гл. 8, п. 15, где рассматривался принцип дополнительности).

*) Процесс перехода, описанный выше, исследовался математически в гл. 18, пп. 1—10. Отсылаем читателя, в частности, к гл. 18, п. 9, где указывалось, что, пока переход имеет место, система не находится в определенном (но неизвестном) собственном состоянии невозбужденного гамилтониана H_0 , а, наоборот, одновременно покрывает целую область этих состояний. Однако в это время происходит непрерывное изменение вероятности перехода в одно определенное собственное состояние H_0 в результате процесса взаимодействия с системой, которая может обеспечить измерение H_0 .

**) См. гл. 8, п. 27, где аналогии с дискретными переходами обсуждаются в связи с процессами мышления. Там мы были вынуждены описать определенные формы процессов мышления в понятиях скачкообразных изменений, потому что дискретно различны определенные логические формы, к которым такие процессы могут привести (например, мыслится, что каждая логическая категория совершенно отделена от всех других). С другой стороны, промежуточные стадии процесса мышления, связывающие эти логически выраженные определенные понятия, непрерывны и до некоторой степени имеют сходство с не полностью определенными потенциальными возможностями квантовой теории.

15. Парадокс Эйнштейна, Розена и Подольского. Эйнштейн, Розен и Подольский [66] подвергли серьезной критике справедливость общепринятой интерпретации квантовой теории. Эти возражения были изложены в виде парадокса, к которому они пришли на основе анализа некоторого мысленного эксперимента, который мы позже детально обсудим.

Однако было показано, что их критика несправедлива [67, 68] и основана на таких предположениях относительно строения материи, которые целиком противоречат квантовой теории *). Несмотря на это их явные предположения кажутся на первый взгляд настолько естественными и неопровержимыми, что тщательное изучение поднятых этими авторами вопросов приводит к более глубокому анализу различия между классическими и квантовыми представлениями о структуре материи.

Прежде всего авторы дают определенные критерии полноты физической теории. Необходимыми требованиями к *полноте* физической теории они считают следующие.

1) Каждый элемент физической реальности должен иметь копию в *полной* физической теории.

Что касается того, из чего в действительности состоят правильные элементы, при помощи которых должна быть выражена физическая теория, то они считают, что этот вопрос может быть окончательно решен только при помощи опытов и наблюдений. Несмотря на это они предлагают следующий критерий для определения элемента реальности, который кажется им *достаточно* точным.

2) Если без какого-либо возмущения системы мы можем с уверенностью (т. е. с вероятностью, равной единице) предсказать значение физической величины, то, значит, существует элемент реальности, соответствующий этой физической величине.

Авторы соглашаются, что элементы физической реальности могут быть хорошо определены и другим способом, но они стремятся показать, что даже если ограничиться элементами, которые могут быть различимы при помощи только *этого* критерия, то квантовая теория в своей современной интерпретации приводит к противоречивым результатам.

Однако использование этого точно высказанного критерия покоится на определенных неявных предположениях, которые являются неотъемлемой частью трактовки, даваемой авторами, но которые никогда явно не устанавливались.

Эти предположения следующие.

3) Вселенная может быть правильно разложена на различные и отдельно существующие «элементы реальности».

) По этому вопросу см. также [78], § 129 и [88*]. — *Прим. ред.*

4) Каждый из этих элементов является двойником *точно* определенной математической величины, появляющейся в *полной* теории *).

Мы временно согласимся с вышеприведенными критериями и предположениями, чтобы проследить за дальнейшим развитием аргументов, приводимых авторами, но в п. 18 покажем, что эти критерии нельзя применить в области квантовых закономерностей.

Как уже обсуждалось, в современной квантовой теории предполагается, что все относящиеся к делу физические сведения о системе содержатся в ее волновой функции. Поэтому, если две системы имеют волновые функции, которые отличаются самое большее на постоянный фазовый множитель, то о них можно сказать, что они находятся в одинаковом квантовом состоянии (см. гл. 9, п. 4). Своим критерием реальности авторы хотели показать, что такая интерпретация современной квантовой теории несостоятельна и что волновая функция неспособна содержать полное описание всех физически существенных факторов (или «элементов реальности»), существующих внутри системы. Если их концепция сможет быть доказана, то это должно привести к поискам более полной теории, возможно содержащей нечто подобное скрытым параметрам (гл. 2, п. 5, гл. 5, п. 3), в терминах которых современная квантовая теория должна являться предельным случаем.

Рассмотрим теперь произвольную наблюдаемую величину A , имеющую ряд собственных функций ψ_a , которые принадлежат ряду собственных значений, обозначенных через a . Можно сказать, что когда волновая функция равна ψ_a , то система находится в квантовом состоянии, в котором наблюдаемая величина A имеет определенное значение a . В такой ситуации Эйнштейн, Розен и Подольский сказали бы, что в системе существует элемент реальности, соответствующий наблюдаемой величине A . Но рассмотрим теперь другую наблюдаемую величину B , которая не коммутирует с A , т. е. не существует волновой функции, для которой A и B имели бы одновременно определенные значения. Если теперь применить явно предположение 4), что каждый элемент реальности должен быть двойником *точно* определенной математической величины, появляющейся в *полной* теории, то обычное предположение о волновой функции, дающей *полное* описание действительности, приводит к выводу, что A и B не могут существовать одновременно **). Это следует из того факта, что пред-

*) Этот критерий по существу является более сильной формой формулировки критерия 1). Эйнштейн, Розен и Подольский не ограничивались предположением 1), что каждый элемент реальности всегда имеет двойника в полной теории, но они также неявно предполагают, что этот двойник должен всегда быть точно определенным.

**) В п. 18 мы сделаем обратное предположение, что элементы реальности существуют лишь в неточно определенной форме и не обязательно должны быть двойниками точно определенных математических величин, появляющихся в полной теории. Следовательно, мы откажемся от явных предположений 3) и 4).

положительно полная волновая теория не содержит *точных* определенных математических элементов, соответствующих одновременному существованию A и B . Однако эта точка зрения заставляет нас также предположить, что когда B измерено и имеет определенное значение, то элементы, соответствующие A , разрушаются (так как мы предполагали, что они не могут существовать вместе с элементами, соответствующими B). Кажется естественным предположить, что это разрушение вносится квантами, которые передаются от измерительной аппаратуры к исследуемой системе. Однако при такой интерпретации некоммутативности двух наблюдаемых величин существенно, чтобы в каждом измерении действительно возникало возмущение от измерительной аппаратуры, которое искажало бы все элементы реальности, соответствующие не коммутирующим с измеряемой переменной наблюдаемым величинам. Если бы такого возмущения не было, то можно было бы иметь систему, которая первоначально имела определенное значение A , а затем измерять B без всякого изменения элементов, соответствующих A . Таким образом получилась бы система, в которой элементы реальности, соответствующие A и B , существуют вместе в одно и то же время. В следующем пункте мы разберем мысленный эксперимент, предложенный Эйнштейном, Розеном и Подольским, который действительно позволяет измерять данную наблюдаемую величину без какого бы то ни было возмущения соответствующей системы. При помощи этого типа мысленного эксперимента они получили противоречие между предположением, что квантовая теория дает полное описание реальности, и предположением, что их критерий в действительности должен быть обязательно применим в любой полной теории. Если принять их критерий, то у нас останется единственная альтернатива, а именно что квантовая теория не дает полного описания действительности. Это и есть тот вывод, который они первоначально предполагали получить.

16. Мысленный эксперимент Эйнштейна, Розена и Подольского. Опишем теперь мысленный эксперимент Эйнштейна, Розена и Подольского. Мы несколько изменили этот опыт, однако его форма по существу остается той, которую предлагали авторы, и вместе с тем это изменение значительно облегчает математическую трактовку опыта.

Предположим, что мы имеем молекулу, содержащую два атома в состоянии, для которого полный спин равен нулю, и пусть спин каждого атома равен $\hbar/2$. Грубо говоря, это означает, что спин каждой частицы направлен точно противоположно спину другой частицы, поскольку вообще можно говорить, что спин имеет определенное направление. Предположим теперь, что молекула расщепляется на атомы при помощи такого процесса, который не изменяет полного момента количества движения. Оба атома начнут расходиться и вскоре перестанут заметно взаимодействовать. Однако их суммар-

ный спиновый момент остается равным нулю, так как предполагается, что на систему не действует извне никакой вращательный момент.

Если спин являлся бы классической переменной, подобной моменту количества движения, то объяснение этого процесса было бы следующим. Пока оба атома существовали вместе в форме молекулы, каждая компонента момента количества движения отдельного атома должна была иметь определенное значение, всегда противоположное его значению для другого атома. Поэтому полный момент количества движения должен равняться нулю. Когда атомы разделены, то каждая компонента спинового момента одного атома продолжает оставаться противоположной компоненте другого. Между векторами спиновых моментов поэтому должна быть известная корреляция (связь). Первоначально эта корреляция была создана, когда атомы, взаимодействуя образовывали молекулу с нулевым результирующим спином. После того, как атомы разделились, корреляция поддерживалась динамическими уравнениями движения для отдельных векторов спина, что привело к сохранению каждой компоненты обоих векторов спинового момента.

Предположим теперь, что измеряется спиновый момент какой-нибудь одной из этих частиц, скажем 1. Вследствие существования корреляции можно немедленно заключить, что вектор момента количества движения другой частицы (2) равен и противоположен тому же вектору частицы 1. Таким образом, можно косвенно измерить момент количества движения частицы 2, измеряя соответствующий вектор частицы 1.

Разберем теперь, как должен быть описан этот опыт в квантовой теории. Здесь исследователь может измерить одну из компонент (x , y или z) спина частицы 1, но не больше чем одну из них в одном опыте. Несмотря на это получается, как мы увидим, что, какую бы компоненту ни измерить, результаты связаны между собой. Поэтому, если измеряется та же компонента спина атома 2, то всегда будет получаться для нее противоположное значение. Следовательно, измерение любой компоненты спина атома 1 дает, как и в классической теории, косвенное измерение той же компоненты спина атома 2. Так как, согласно гипотезе, две частицы больше не взаимодействуют, то мы получили способ измерения произвольной компоненты спина частицы 2 без какого-либо воздействия на эту частицу. Если принять определение элемента реальности 2), предложенное Эйнштейном, Розеном и Подольским, то ясно, что после измерения σ_z для частицы 1, σ_z для частицы 2 надо рассматривать как элемент реальности, существующий отдельно в одной частице 2. Однако если это так, то этот элемент реальности должен был существовать в частице 2 также и до измерения σ_z для частицы 1. С момента прекращения взаимодействия с частицей 2 процесс измерения никак не может

влиять на эту частицу. Но вспомним теперь, что в каждом случае наблюдатель всегда может по желанию переориентировать аппаратуру в произвольном направлении, когда атомы еще «разлетаются», и таким образом получить определенное (но непредсказываемое) значение компоненты спина в любом выбранном им направлении. Поскольку это может быть выполнено без какого-либо возмущения второго атома, то, следовательно, если применим критерий 2) Эйнштейна, Розена и Подольского, во втором атоме должны существовать вполне определенные элементы реальности, соответствующие одновременному определению всех трех компонент его вектора спина. Так как волновая функция может одновременно определить самое большее только одну из этих компонент с полной точностью, то это приводит к выводу, что волновая функция не дает полного описания всех элементов реальности, существующих во втором атоме.

Если бы этот вывод был справедлив, то необходимо было бы искать новую теорию, дающую возможно более полное описание. Однако мы увидим в п. 18, что анализ Эйнштейна, Розена и Подольского неотъемлемо содержит явные предположения 3) и 4), что вселенная действительно состоит из отдельно существующих и точно определенных «элементов реальности». Однако квантовая теория дает совершенно отличную картину структуры вселенной в области квантовых закономерностей. Эта картина, как мы увидим, приводит к совершенно разумному объяснению мысленного опыта Эйнштейна, Розена и Подольского в рамках существующей квантовой теории.

17. Математический анализ опыта по квантовой теории. Перед обсуждением физической интерпретации, которую дает существующая квантовая теория мысленному опыту Эйнштейна, Розена и Подольского, покажем сначала, как этот опыт может быть описан математически.

Система, включающая спины двух атомов, имеет четыре основные волновые функции, из которых можно построить произвольную волновую функцию *). Эти функции имеют вид

$$\psi_a = u_+(1)u_+(2), \quad \psi_c = u_+(1)u_-(2),$$

$$\psi_b = u_-(1)u_-(2), \quad \psi_d = u_-(1)u_+(2),$$

где u_+ и u_- — спиновые волновые функции одной частицы, представляющие соответственно спин $\hbar/2$ и $-\hbar/2$, а обозначения (1) и (2) относятся соответственно к частице, имеющей этот спин. ψ_c и ψ_d представляют два возможных состояния, в которых каждая частица имеет определенную z -компоненту спина в направлении, противоположном z -компоненте другой частицы. Волновая функция для системы

*) Полная волновая функция для системы получается тогда умножением спиновых волновых функций на соответствующие пространственные волновые функции, которые зависят от пространственных координат обеих частиц.

с полным нулевым спином представляет собой следующую линейную комбинацию ψ_c и ψ_d (см. гл. 17, п. 9):

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_c - \psi_d). \quad (22.26)$$

Определенный знак, с которым комбинируются ψ_c и ψ_d , имеет решающее значение при определении результирующего спина: так, если они комбинируются со знаком «+», то момент количества движения будет равен $\hbar$ (но со значением z -компоненты момента количества движения, равной нулю). Запишем здесь этот результат:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_c + \psi_d). \quad (22.27)$$

Ясно, что полный момент количества движения является интерференционным свойством ψ_c и ψ_d . С другой стороны, единственные состояния, в которых каждая частица имеет определенный спин, противоположный спину другой частицы, представлены отдельно или ψ_c , или ψ_d . Следовательно, в любом состоянии, для которого значение σ_z каждой частицы ограничено, полный момент количества движения должен быть неопределенным. Наоборот, если полный спиновый момент имеет определенное значение, то тогда неправильно считать, что любой атом имеет определенное значение своего собственного спина, потому что, если бы это было так, то не могло бы быть интерференции между функциями ψ_c и ψ_d , и именно эта интерференция и требуется для создания определенного значения полного момента количества движения.

Однако помимо того, что определенные фазовые соотношения между ψ_c и ψ_d приводят к определенному значению результирующего спина, они имеют и добавочный физический смысл, определяя корреляцию (связь) результатов при измерении одной и той же компоненты спина каждого атома. Такую корреляцию можно, например, продемонстрировать в процессе измерения z -компоненты спина каждого атома отдельной аппаратурой Штерна—Герлаха (см. рис. 116). С целью упрощения мы можем предполагать, что оба спина измеряются в одно и то же время, хотя это предположение и не влияет существенно на результаты. Тогда гамильтониан в момент измерения равен (см. уравнения (22.10а) и (22.10б))

$$W = \mu (\mathcal{H}_0 + z \mathcal{H}'_0) \sigma_{1,z} + \mu (\mathcal{H}_0 + z_2 \mathcal{H}'_0) \sigma_{2,z},$$

где z_1 — z -координата первого атома, а z_2 — z -координата второго атома (мы предполагаем, что обе части измерительной аппаратуры тождественны по своей конструкции.)

Разложим теперь спиновую волновую функцию, которая существует в процессе измерения, по четырем основным функциям: ψ_a , ψ_b ,

ψ_c и ψ_d . Так как это измерение не изменяет σ_z , то только ψ_c и ψ_d нужно использовать в процессе измерения (заметим, что это единственные члены, которые первоначально присутствовали). Следовательно, можно написать

$$\psi = f_c \psi_c + f_d \psi_d.$$

В нашем случае начальное значение f_c равно $1/\sqrt{2}$. Методами, подобными тем, которые привели к уравнению (22.136), находим

$$i\hbar \frac{\partial f_c}{\partial t} = \mu f_c [(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'_0 z_1) - (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'_0 z_2)],$$

$$i\hbar \frac{\partial f_d}{\partial t} = -\mu f_d [(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'_0 z_1) - (\mathcal{H}_c + \mathcal{H}'_0 z_2)].$$

Решение для f_c и f_d с соответствующими начальными условиями дает для волновой функции сразу после того, как частицы вышли из магнитного поля,

$$f_c = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i \frac{\mu \mathcal{H}'_0}{\hbar} (z_1 - z_2) \Delta t}, \quad f_d = -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i \frac{\mu \mathcal{H}'_0}{\hbar} (z_1 - z_2) \Delta t},$$

где мы подставили $t = \Delta t$ — времени взаимодействия между атомами и неоднородным магнитным полем.

Из волновой функции ψ видно, что равновероятны два результата, представляемые соответственно волновыми функциями ψ_c и ψ_d . При первом возможном результате атом 1 имеет положительное значение σ_z , а атом 2 — отрицательное. Множитель $e^{-i \mu \mathcal{H}'_0 \Delta t (z_1 - z_2)/\hbar}$ выражает собой тот факт, что в опыте Штерна — Герлаха каждый атом получает обратный импульс, направленный противоположно его спину. Аналогично при втором возможном результате атом 2 имеет отрицательное значение σ_z , а атом 1 — положительное. Так же как и в пп. 9 и 11, можно показать, что поскольку аппаратура описывается классически, то волновые функции аппаратуры (которые зависят от z_1 и z_2) придадут спиновой волновой функции неконтролируемые фазовые множители. Таким образом, окончательно получаем

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_c e^{i\alpha_c} + \psi_d e^{i\alpha_d}),$$

где α_c и α_d — неконтролируемые фазовые множители.

Из этого результата видно, что при измерении σ_z для каждого атома получают значения, которые всегда противоположны значениям, полученным для другого атома. Таким образом, мы доказали, что в квантовой теории получается корреляция, напоминающая ту, которая имеет место в классической теории. Однако после того, как измерение закончено, система, имеющая определенный результирую-

щий момент количества движения и неопределенное значение σ_z для каждой отдельной частицы, превращается в систему, имеющую определенную величину σ_z для каждой частицы, но неопределенный результирующий момент количества движения. Более того, точное значение σ_z , которое будет получено для каждой частицы, связано не динамически, а лишь статистически с состоянием системы перед измерением.

Опишем теперь процесс измерения σ_x . Результаты получаются очень похожими, потому что волновая функция для системы с нулевым полным спином, выраженная через v_+ и v_- (собственные функции σ_x), будет такой же, как и при выражении через u_+ и u_- . Следовательно,

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} [v_+(1)v_-(2) - v_-(1)v_+(2)].$$

Теперь можно описать измерение σ_x для каждой частицы точно так же, как это делалось для σ_z . После взаимодействия с измерительной аппаратурой получаем

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} [v_+(1)v_-(2)e^{i\alpha_1} + v_-(1)v_+(2)e^{i\alpha_2}],$$

где α_1 и α_2 — отдельные неконтролируемые фазовые множители.

Следовательно, величина σ_x каждой частицы также связана с величиной σ_x другой частицы, причем сумма этих двух величин равна нулю. Кроме того, легко проверить, что если взять функцию

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a + \psi_b),$$

то, подставляя $v_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_+ + u_-)$ и $v_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_+ - u_-)$, получим волновую функцию

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [v_+(1)v_+(2) + v_-(1)v_-(2)].$$

Это соответствует случаю, когда измерение σ_x обнаруживает, что обе частицы одновременно имеют положительную или отрицательную величину. Отсюда мы видим, что тип могущей возникнуть корреляции величин σ_x зависит от знака, с которым складываются ψ_c и ψ_d , а потому также от результирующего момента количества движения.

В связи с этим обсуждением возникает еще одно существенное замечание, а именно что существование корреляции между атомами не указывает на заметное влияние каким-нибудь образом одного из них на другой после прекращения взаимодействия. Чтобы доказать это утверждение, вычислим прежде всего среднее значение некоторой

функции $g(\sigma_2)$ спиновых переменных одной только частицы 2. С помощью волновой функции, имевшей место до измерения, получаем ввиду ортогональности ψ_c и $g(\sigma_2)\psi_d$:

$$\bar{g}_0(\sigma_2) = \frac{1}{2} (\psi_c^* - \psi_d^*) g(\sigma_2) (\psi_c - \psi_d) = \frac{1}{2} [\psi_c^* g(\sigma_2) \psi_c + \psi_d^* g(\sigma_2) \psi_d].$$

После того, как измерен спин первой частицы, среднее значение $g(\sigma_2)$ становится равным

$$\begin{aligned} \bar{g}_f(\sigma_2) &= \frac{1}{2} (\psi_c^* e^{-i\alpha_c} - \psi_d^* e^{-i\alpha_d}) g(\sigma_2) (\psi_c e^{i\alpha_c} - \psi_d e^{i\alpha_d}) = \\ &= \frac{1}{2} [\psi_c^* g(\sigma_2) \psi_c + \psi_d^* g(\sigma_2) \psi_d]. \end{aligned}$$

Это то же самое выражение, которое было получено без измерения спиновых переменных частицы 1. Однако поведение двух спинов связано, несмотря на то что каждый из них ведет себя независимо от другого после прекращения взаимодействия.

18. Физическое описание причин корреляции. Мы математически доказали, что в системе, состоящей из двух атомов с нулевым результирующим спином, спиновые компоненты каждого атома в произвольном направлении будут связаны между собой. Последнее имеет место несмотря на то, что, согласно существующей интерпретации квантовой теории, эти спиновые компоненты не могут все одновременно обладать определенными собственными значениями. Мы хотим показать теперь, что парадоксальные результаты Эйнштейна, Розена и Подольского при интерпретации этого факта нельзя получить, если не делать явных предположений 3) и 4), а именно что вселенная может быть точно разделена на элементы реальности, каждый из которых является двойником точно определенной математической величины, появляющейся в полной теории. Эти предположения, которые являются сущностью всей классической теории, можно, вероятно, представить как гипотезу, согласно которой физическая реальность построена по математической схеме. Последняя необходима для того, чтобы каждый элемент, появляющийся в реальной вселенной, *точно* соответствовал некоторому члену, появляющемуся в полном ряду математических уравнений. Хотя такая гипотеза кажется нам сейчас совершенно естественной, но она, несомненно, не имеет смысла*). Действительно, в квантовой теории делается совсем другая, но также правдоподобная гипотеза, касающаяся основных свойств материи. Предполагается, что однозначное соответствие между математической теорией и точно определенными

*) Эта исторически сравнительно новая идея возникла в связи с большим успехом математического анализа в механике и электродинамике в период между шестнадцатым и началом двадцатого века (см. гл. 8, пп. 2—10).

«элементами реальности» существует только для классических закономерностей. В области квантовых законов математическое описание с помощью волновой функции действительно не находится в однозначном соответствии с истинным поведением описываемой системы, а дает лишь статистическое соответствие *) (см. гл. 6, п. 4). Однако мы утверждаем, что волновая функция (в принципе) может дать наиболее полное возможное описание системы, которое согласуется с действительной структурой материи. Каким образом можно примирить эти два определения волновых функций? Мы делаем это, предполагая, что свойства данной системы существуют в общем случае только в неточно определенной форме и что при более точной трактовке они не являются реальными точно определенными свойствами, а лишь потенциальными возможностями (см. гл. 6, пп. 9 и 13, гл. 8, пп. 14 и 15, гл. 22, п. 13.) Эти возможности более определенно реализуются при взаимодействии с соответствующей классической системой, например с измерительной аппаратурой. Рассмотрим две некоммутирующие наблюдаемые величины, например импульс и координату электрона. Мы говорим, что в общем случае ни одна из этих величин не существует в данной системе в *точно* определенной форме, поскольку иначе нарушается соотношение неопределенностей (см. о дополнителности в гл. 8, п. 15). Каждая из этих переменных имеет потенциальную возможность стать более определенной величиной за счет уменьшения степени определенности другой при взаимодействии с соответствующей измерительной аппаратурой. Следовательно, такие свойства, как координата и импульс, являются не только не полностью определенными и противоположными потенциальными возможностями, но их также при очень точном описании нельзя считать принадлежащими одному лишь электрону, так как реализация этих потенциальных возможностей зависит в такой же степени от системы, с которой он взаимодействует, как и от самого электрона (гл. 6, п. 13, гл. 8, п. 16). Это означает, что в действительности это не точно определенные «элементы реальности», принадлежащие электрону. Следовательно, мы вступаем в противоречие с предположениями 3) и 4) Эйнштейна, Розена и Подольского.

Квантовомеханические спиновые переменные нужно интерпретировать подобным же образом. В то время как Эйнштейн, Розен и Подольский говорят, что единственная существующая компонента спина — это та, которая может быть точно определена при помощи волновой

) Самое главное во всей обсуждаемой здесь проблеме заключается в том, что до процесса измерения оба квантовых объекта существенно взаимодействовали друг с другом, образуя единую квантовую систему (молекулу). Именно это реальное физическое обстоятельство и приводит к существованию корреляции между проекциями спинов обеих частиц, хотя измеряется проекция только одного спина. Подробнее об этом см. в [78], § 129. — *Прим. ред.*

функции, мы говорим, что в общем случае все три компоненты существуют одновременно в грубо определенных формах и что любая из них обладает потенциальной возможностью стать более определенной за счет остальных, если рассматриваемый атом взаимодействует с измерительной аппаратурой. Вероятность получения определенного значения какой-либо компоненты спина в соответствующем процессе измерения пропорциональна квадрату амплитуды коэффициента той части волновой функции, которая соответствует этой компоненте. Однако мы должны вспомнить, что полная спиновая волновая функция для каждого атома может быть разложена по собственным функциям u_+ и u_- спиновых переменных в *любом* направлении, следовательно, $\psi = a_+ u_+ + a_- u_-$. При таком разложении фазовые соотношения между u_+ и u_- помогают определить распределение по спиновым компонентам в других направлениях (см. гл. 17, пп. 6 и 7). (Следовательно, если u_+ и u_- представляют собственные функции σ_z , то собственная функция σ_x получается, когда $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_+ \pm u_-)$.) Это означает, что, пока суще-

ствуют определенные фазовые соотношения между u_+ и u_- , нельзя классифицировать систему по значениям спина, которые соответствуют или *полностью* u_+ , или *полностью* u_- с соответствующими вероятностями $|a_+|^2$ и $|a_-|^2$ (гл. 6, п. 4, гл. 22, п. 10). Наоборот, мы должны сказать, что система не допускает такой классификации и в некотором смысле покрывает оба состояния одновременно не точно определенным способом (гл. 16, п. 25, гл. 8, п. 15). Следовательно, мы должны отказаться от классической картины с точно определенной спиновой переменной для каждого атома и заменить ее нашим квантовым представлением о потенциальной возможности, вероятность развития которой дается волновой функцией. И только когда волновая функция есть собственная функция данной компоненты спина, система может (взаимодействуя с соответствующей аппаратурой) развить предсказываемое значение этой компоненты спина.

Если обратиться к нашей системе двух атомов, которая имеет результирующий спин, равный нулю, то из уравнения (22.26) мы видим, что, поскольку волновая функция

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_c - \psi_d)$$

имеет определенные фазовые соотношения между ψ_c и ψ_d , эта система должна одновременно находиться в состояниях, соответствующих ψ_c и ψ_d . Таким образом, для данного атома *ни одна* компонента спина данной переменной не имеет точно определенного значения, пока не наступит взаимодействие с соответствующей системой, скажем с измерительной аппаратурой. Но как только какой-нибудь из атомов (например, 1) начинает взаимодействовать с аппаратурой, измеряющей

данную компоненту спина, нарушается определенное фазовое соотношение между ψ_c и ψ_d . Это означает, что система проявляет себя так, как если бы она была или в состоянии ψ_c , или ψ_d . Следовательно, в каждый момент, когда частица 1 получает определенное значение компоненты спина, например, в направлении оси z , волновая функция частицы 2 автоматически принимает такую форму, что она гарантирует появление противоположного значения σ_z , если эта частица также взаимодействует с аппаратурой, измеряющей ту же компоненту спина. Таким образом, волновая функция описывает распространение коррелированных между собой потенциальных возможностей. Так как разложение волновой функции ψ_0 принимает ту же форму для собственных функций произвольной компоненты спина, то аналогичная корреляция будет получена, если измерять одну и ту же компоненту спина каждого атома в любом направлении. Более того, так как потенциальные возможности появления определенной спиновой компоненты не реализуются неизбежно при взаимодействии с аппаратурой, то нет противоречия в утверждении, что, пока атомы еще «разлетаются», можно поворачивать аппаратуру в произвольном направлении и тем самым выбрать любую желательную компоненту спина каждого атома, чтобы из нее получить определенные и коррелированные значения.

Наконец, по-видимому, интересно рассмотреть в новом освещении тот факт, что математическое описание, даваемое волновой функцией, не находится в однозначном соответствии с действительным поведением материи. Из этого факта мы вынуждены заключить, что, в противоположность общему мнению, квантовая теория менее математична в своей философской основе, чем классическая теория, поскольку, как мы видели, она не предполагает, что вселенная построена по точно определенному математическому плану. Наоборот, мы должны прийти к точке зрения, что волновая функция — это абстракция, дающая математическое отражение определенных сторон реальности, но не однозначная карта ее. Чтобы получить описание *всех* аспектов вселенной, надо дополнить математическое описание физической интерпретацией при помощи не полностью определенных потенциальных возможностей*). Кроме того, современная форма квантовой теории указывает на то, что вселенную нельзя привести в однозначное соответствие ни с каким мыслимым видом точно определенных величин (математических) и что полная теория всегда потребует понятий более общих, чем понятие разложения на точно определенные элементы. Мы можем ожидать, что даже более общие типы понятий современной квантовой теории будут давать лишь

*) См. гл. 23, где более полно разобрано, как должно быть дополнено понятие волновой функции интерпретацией потенциальных возможностей для получения различных классически описываемых результатов.

частичное отражение бесконечно сложной и тонкой структуры вселенной. По мере развития науки, вероятно, появятся и более новые понятия, которые в настоящее время лишь едва намечаются. Но нет оснований предполагать, что эти новые понятия заставят вернуться к сравнительно простой идее об однозначном соответствии между реальной вселенной и точно определенными математическими абстракциями.

19. Доказательство несовместимости квантовой теории с понятием скрытых параметров. Можно теперь воспользоваться некоторыми результатами анализа парадокса Эйнштейна, Розена и Подольского, чтобы попытаться доказать несовместимость квантовой теории с предположением о существовании скрытых динамических параметров (см. гл. 2, п. 5 и гл. 5, п. 3). Прежде всего заметим, что предположение об отдельно существующих и точно определенных элементах реальности должно быть основано на точном динамическом описании при помощи скрытых параметров. Без таких элементов не к чему было бы применить классически определенное динамическое описание. Аналогично, как мы видели в гл. 8, п. 20, существование отдельных элементов требует для своего непротиворечивого применения точной динамической теории взаимосвязей между этими элементами. Следовательно, разложение вселенной на точно определенные элементы и синтез этих элементов, согласно точным динамическим законам, должны или устоять, или рушиться вместе.

Из рассуждений Эйнштейна, Розена и Подольского можно заключить, что если вселенная может быть объяснена при помощи таких точно определенных элементов, то правильная интерпретация двух некоммутирующих элементов, таких, как импульс и координата, заключается в понятии, что они соответствуют одновременно существующим элементам реальности. Для согласования этого с соотношением неопределенностей необходимо тогда предположить, что мы просто неспособны измерить две одновременно существующие величины с полной точностью. Но мы видели в гл. 6, п. 11, что любое такое предположение должно привести к противоречию с соотношением неопределенностей, которое является одним из основных выводов квантовой теории. Следовательно, никакая теория механически определенных скрытых параметров не может привести ко *всем* результатам квантовой теории. Такая механическая теория может быть мыслима настолько просто построенной, что она должна была бы согласоваться с квантовой теорией для широкой области предсказанных экспериментальных результатов*). Но мысленный опыт, разо-

*) Мы не хотим утверждать здесь, что кто-либо и когда-нибудь давал конкретный и успешный пример такой теории, а лишь утверждаем, что такая теория, насколько мы знаем, мыслима.

бранный в гл. 6, п. 11, должен тогда являться решающим испытанием теории. Если в этом опыте нам удастся нарушить соотношение неопределенностей, то теория механически определенных переменных получит сильную поддержку. Но если это не удастся, то мы получим довольно убедительное доказательство того, что никогда не удастся найти правильной механической теории. К сожалению, такой опыт еще недоступен современной технике эксперимента, но вполне возможно, что он когда-нибудь будет осуществлен. Но, пока такого расхождения между квантовой теорией и экспериментом не обнаружено, кажется наиболее разумным предположить, что квантовая теория в основном правильна, она представляет внутренне непротиворечивую теорию, дающую согласие с широкой областью таких экспериментов, которые не могут быть правильно истолкованы никакой другой известной теорией *).

*) В связи с этим выводом можно заметить следующее: автор прав, когда утверждает, что не существует «скрытых» параметров, если под ними понимать какие-либо «классические» глубинные материальные связи. Однако мы можем говорить о «скрытых» параметрах как о более тонких глубинных связях в микромире, которые еще дальше уведут нас от грубых классических представлений и которые не исключают статистического характера микроявлений, ибо за ними лежат еще *более* глубинные материальные связи, не являющиеся коренными и определяющими для данного круга микроявлений, который объясняется законами существующей квантовой механики, излагаемой в этой книге.

Обращаем внимание читателей на очень интересную статью акад. В. А. Фока [89*], в которой он развивает последовательную материалистическую интерпретацию квантовой механики.

В списке дополнительной литературы приведены также последние работы, посвященные проблеме квантовых измерений (см. [91*—98*]). — *Прим. ред.*

СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ КВАНТОВЫМ И КЛАССИЧЕСКИМ ПРЕДСТАВЛЕНИЯМИ

На протяжении этой книги была сделана попытка дать количественное описание свойств материи в представлениях квантовой теории. При этом мы пришли к выводу, что квантовые представления о природе материи резко отличаются от прежних представлений классической физики. Тем не менее, несмотря на существенные различия, оказалось возможным с помощью принципа соответствия (гл. 2, п. 5, гл. 3, п. 8, гл. 9, п. 24) построить квантовую теорию таким образом, что она включает в себя классическую теорию в качестве классического предела. С первого взгляда можно сделать вывод, что классическая теория является просто предельным, или частным, случаем квантовой теории. В этой главе мы хотим глубже исследовать соотношение между классическими и квантовыми представлениями и показать, что квантовая теория в ее настоящей форме действительно предполагает справедливость классических представлений. При этом мы придем к выводу, что классические понятия нельзя рассматривать просто как предельные формы квантовых понятий. Их надо объединять с квантовыми воззрениями таким путем, чтобы при полном описании одни дополняли другие.

Начнем с краткого изложения основных различий между классическими и квантовыми представлениями. Классические представления характеризуются тремя допущениями, касающимися свойств материи:

- 1) Мир можно разложить на отдельные элементы.
- 2) Состояние каждого элемента можно описать через динамические переменные, которые определены с произвольной степенью точности.

3) Взаимоотношения между частями системы можно описать с помощью точных динамических законов, которые определяют изменение вышеуказанных динамических переменных со временем через их начальные значения. Поведение системы в целом можно рассматривать как результат взаимодействия всех ее частей.

Характеристикой классической области является то, что в ее пределах существуют предметы, явления и события, которые раздельны, точно определены и обладают надежными и воспроизводи-

мыми свойствами, с помощью которых их можно выделять и сравнивать (см., например, гл. 8, пп. 17—22). При таком взгляде на мир его проще всего описывать на нашем обычном научном языке, когда считается идеалом выражать каждое представление через точно определенные элементы с точно определенными логическими соотношениями между ними.

Однако когда мы переходим к описанию квантовых представлений, то оказывается, что при использовании обычного научного языка с такой степенью точности возникают затруднения и неудобства в способах выражения. Как было показано (см. гл. 6, пп. 9 и 13, гл. 8, пп. 14 и 15), квантовые свойства материи связаны с не полностью определенными потенциальными возможностями. Последние могут более определенно реализоваться только при взаимодействии с системой, которую можно описать классически (в частном случае это может быть измерительная аппаратура) (гл. 22). Поскольку даже так называемые «внутренние» свойства системы (волновые или корпускулярные) проявляются только при взаимодействии с другими системами, то ясно, что под квантовыми свойствами материи следует понимать свойства неделимого единства всех взаимодействующих систем. Поэтому мы вступаем в противоречие с допущениями 1) и 2) классической теории, так как в квантовой области не существует ни точно определенных элементов, ни точно определенных динамических переменных, которые описывают поведение этих элементов. Поэтому неудивительно, что допущение 3) тоже не удовлетворяется в квантовой теории, так как динамические законы бессмысленны в приложении к явлениям, где нет точно определенных переменных, к которым их можно было бы применить. Действительно, вместо точно определенных переменных, находящихся в однозначном соответствии с действительным поведением материи, в квантовой области имеется лишь волновая функция, находящаяся в статистическом соответствии с этим поведением (см. гл. 6, п. 4).

Классическая и квантовая теории встречаются в связи с истолкованием волновой функции. Физическое истолкование волновой функции всегда проводится с помощью представления о вероятности того, что система при взаимодействии с подходящей измерительной аппаратурой будет обладать определенной величиной измеряемой переменной. Но, как было показано, последний этап действия измерительной аппаратуры всегда можно описать классически (см. гл. 22, п. 3). Действительно, только в классическом смысле можно получить определенные результаты опыта в виде отдельных событий, однозначно связанных с различными возможными величинами измеряемой физической величины (см. гл. 22, пп. 3, 4, 11 и 13). Это означает, что квантовая теория не имеет смысла без использования классических понятий. *Следовательно, квантовая теория предполагает существование классических явлений и общую правильность*

классических понятий при описании этих явлений. Из нее не следует, что классические понятия являются предельным случаем квантовых понятий).*

На первый взгляд против этого вывода можно возразить, указав, что можно исключить необходимость существования классических явлений, используя обычный процесс перехода к классическому пределу, например, с помощью приближения ВКБ (гл. 12). Ошибочность этого возражения станет видна, если вспомним, что даже в том случае, когда волновой пакет определен только с классической степенью точности, он в конечном счете расплывается на огромные расстояния (гл. 3, п. 5). Все же исследуемый объект (например, электрон) всегда можно найти внутри произвольно малой области пространства, в котором измерено его положение. Следовательно, квантовое описание (т. е. только с помощью волновой функции) в общем неадекватно отражает определенность физических свойств, которые электрон может проявлять при его взаимодействии с соответствующими измерительными приспособлениями. Чтобы получить способ истолкования волновой функции, надо с самого начала постулировать существование классических явлений, с помощью которых можно реализовать определенные результаты измерений. Поэтому принцип соответствия есть просто условие согласованности, требующее, чтобы квантовая теория вместе с ее классическим истолкованием в пределе больших квантовых чисел переходила в простую классическую теорию.

Необходимость привлечения классических явлений и связанных с ними понятий указывает на то, что поведение системы в больших масштабах не всегда можно полностью выразить в терминах понятий, отвечающих малым масштабам. Поэтому, как мы видели, понятия, соответствующие квантовым явлениям, суть не полностью определенные потенциальные возможности. При переходе от малых масштабов к большим появляются новые (классические) свойства, которые нельзя вывести из квантового описания с помощью только одной волновой функции, но которые тем не менее согласуются с квантовым описанием. Как мы видели, эти новые свойства проявляются в существовании определенных предметов и событий**), которые не могут существовать в квантовой области.

*) Как, например, можно рассматривать механику Ньютона предельным случаем специальной теории относительности.

**) В связи с этим отметим, что до тех пор, пока систему можно описывать классически, ее свойства можно рассматривать как определенные, независимо от того, изучены ли они во всех деталях или нет. Так, классически допускается, что в ящике, содержащем молекулы газа, каждая молекула занимает определенное положение в каждый момент времени, хотя практически невозможно определить положение каждой молекулы. Только тогда, когда становятся важными квантовые явления (например, в вырожденном газе), это допущение перестает быть правильным.

Свойства больших и малых масштабов не независимы, а находятся в теснейшей взаимосвязи. Как мы видели, только с помощью точно определенных классических явлений реализуются квантово-механические потенциальные возможности. Более того, эта внутренняя зависимость взаимна, поскольку только с помощью квантовых представлений о молекулах, представляющих большой масштаб, можно полностью понять поведение системы. Итак, необходимы и свойства большого масштаба, и свойства малого масштаба, чтобы объяснить дополняющие друг друга аспекты более полного неделимого объекта, а именно системы в целом.

Чтобы более детально определить фактическую связь между свойствами материи в больших и малых масштабах, можно описать эти два вида свойств в терминах взаимодействия двух противоположных направлений. Из квантовых представлений получим непрерывное стремление системы находиться во всей области своих потенциальных возможностей, т. е. избежать связей с любой системой категорий, которая, в соответствии с классическим образом мышления, ограничивает поведение системы каким-либо специфическим путем (см. гл. 8, п. 15 и гл. 16, п. 25). С другой стороны, в классической области наблюдается, как было показано, непрерывное стремление явлений к тому, чтобы стать определенными, т. е. какая-то одна из потенциальных возможностей стремится неизменно реализоваться за счет всех других возможностей. Например, при измерении система проявляет какое-то одно значение измеряемой переменной, а все другие возможности отбрасываются. (В связи с этим см. обсуждение «редукции» волновой функции в гл. 6, п. 4 и гл. 22, п. 10.) Наличие определенного результата измерений в классической области отражается в микроскопической области двумя путями. Прежде всего для системы берется область значений измеряемого свойства, соответствующая области, которая согласуется с областью неопределенности измерения. Поэтому сужение потенциальных возможностей в классическом масштабе сопровождается аналогичным сужением возможностей в квантовом масштабе. Но в том же самом процессе, в котором квантовая система получает более определенное значение измеряемой переменной, она претерпевает соответствующее уменьшение определенности дополнительной переменной (или переменных). (См., например, обсуждение соотношения неопределенности в гл. 5, а также в гл. 6, п. 7.) Поэтому с сужением данной области потенциальных возможностей всегда связан компенсирующий процесс расширения области возможностей других типов. Появление новых потенциальных возможностей отражается на дальнейших изменениях в классических масштабах и т. д. Это означает, что при непрерывном взаимодействии между квантовыми потенциальными возможностями и их классической реализацией система подвергается непрерывной серии преобразований.

Подытоживая все вышесказанное, отметим, что квантовая теория развивается путем, требующим новых понятий или соотношений между свойствами данной системы в большом и малом масштабах. В данной главе мы обсудили два аспекта этих новых понятий:

1. Квантовая теория предполагает наличие классических явлений и правильность классических представлений при их описании.

2. Определенные классические представления о системах большого масштаба нельзя вывести из квантовомеханических представлений об элементах малого масштаба. Напротив, классическая определенность и квантовые потенциальные возможности дополняют друг друга при полном описании системы в целом.

Хотя на современном этапе развития квантовой теории эти представления и не выражены явно, можно предполагать, что успешное распространение квантовой теории на область ядерных масштабов, по-видимому, может более явно обосновать ту мысль *), что природа ядерных явлений в определенной степени зависит от макроскопического окружения **).

*) В связи с этим см. гл. 22, п. 12, где было показано, что определение свойств системы малого масштаба возможно только в результате взаимодействия с системами большого масштаба, претерпевающими необратимые процессы. В параллель с вышеприведенным допущением можно предположить, что необратимые процессы, происходящие в окружающей среде большого масштаба, также могут явно проявиться в основных уравнениях, описывающих явления в ядерных масштабах.

**) В связи с содержанием гл. 23 следует заметить, что в современной квантовой механике мы изучаем объективные закономерности, для которых определяющими, коренными материальными связями являются связи между микросистемами и их макрочередением. Именно это и определяет особый характер взаимосвязи квантовых и классических представлений. Они выступают равноправными партнерами в теории, хотя в предельном случае ($\hbar \rightarrow 0$) квантовая механика и переходит в классическую, как более узкую и грубую трактовку действительного природного мира. Такое положение, как показывает практика современной физической науки и современной техники, не может помешать нам открывать новые черты закономерностей микромира и использовать их для практических целей. — *Прим. ред.*

ЛИТЕРАТУРА

1. Bohr N., Atomic Theory and the Description of Nature, London, 1934.
2. Born M., Atomic Physics, Glasgow, 1945.
3. Born M., Mechanics of the Atom, London, 1927. (Имеется перевод: М. Борн, Лекции по атомной механике, т. I, ГНТИУ, Х.—К., 1934.)
4. Dirac P. A. M., The Principles of Quantum Mechanics, 3d ed., Oxford, 1947. (Имеется перевод: П. А. М. Дирак, Основы квантовой механики, Физматгиз, 1960).
5. Heisenberg W., The Physical Principles of the Quantum Theory, Chicago, 1930. (Имеется перевод: В. Гейзенберг, Физические принципы квантовой теории, ГТТИ, 1932.)
6. Kramers H. A., Die Grundlagen der Quantentheorie, Leipzig, 1938.
7. Mott N. F., An Outline of Wave Mechanics, London, 1934.
8. Mott N. F. and I. N. Sneddon, Wave Mechanics and Its Application, Oxford, 1948.
9. Pauli W., Die Allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik, Ann. Arbor, Mich.: Edwards Bros., Inc., 1946, Reprinted from Handbuch der Physik, 2 Aufl., Band 24, 1 Teil. (Имеется перевод: В. Паули, Общие принципы волновой механики, Гостехиздат, 1947.)
10. Pauling L. and Wilson E., Introduction to Quantum Mechanics, New York, 1935.
11. Richtmeyer F. K. and Kennard E. H., Introduction to Modern Physics, 3d ed., New York, 1933.
12. Rojansky V., Introductory Quantum Mechanics, New York, 1938.
13. Ruark A. E. and Urey H. C., Atoms, Molecules and Quanta, New York, 1930.
14. Schiff L., Quantum Mechanics, New York, 1949 (Имеется перевод: Л. Шифф, Квантовая механика, ИЛ, 1958.)
15. Tolman R. C., The Principles of Statistical Mechanics, Oxford, 1938.
16. Seitz F., The Modern Theory of Solids, New York, 1946. (Имеется перевод: Ф. Зейтц, Современная теория твердого тела, Гостехиздат, 1949.)
17. Wentzel G., Quantum Theory of Fields, New York, 1948. (Имеется перевод: Г. Вентцель, Введение в квантовую теорию волновых полей, Гостехиздат, 1947.)
18. Tolman R. C., Relativity, Thermodynamics and Cosmology, Oxford, 1934.
19. Thomson J. J., Conduction of Electricity through Gases, 2d ed., p. 321, New York.
20. Lorentz H. A., Theory of Electrons, Leipzig, 1909. (Имеется перевод: Г. А. Лорентц, Теория электронов и ее применение к явлениям свечения и теплового излучения, Гостехиздат, 1956.)
21. Stratton J. A., Electromagnetic Theory, New York, 1941. (Имеется перевод: Дж. А. Страттон, Теория электромагнетизма, Гостехиздат, 1948.)
22. Heitler W., Quantum Theory of Radiation, Oxford, 1936. (Имеется перевод: В. Гайтлер, Квантовая теория излучения, ИЛ, 1956.)
23. Pauli W., and Weisskopf V., Helv. Phys. Acta 7, № 7, 709, (1934).

24. Pais A., Positron Theory, Princeton, 1949.
25. Feynman R. P., Rev. Mod. Phys. 20, 377 (1948). (Имеется перевод в сб. «Вопросы причинности в квантовой механике», ИЛ, 1955, стр. 167.)
26. Bethe H., Elementary Nuclear Theory, New York, 1947. (Имеется перевод: Г. Бете, Лекции по теории ядра, ИЛ, 1949.)
27. Jeukens F. A. and White H. E., Fundamentals of Physical Optics, New York, 1937.
28. Mott N. F. and Massey H. S. W., Theory of Atomic Collisions, Oxford, 1933. (Имеется перевод: Н. Мотт и Г. Мессси, Теория атомных столкновений, ИЛ, 1951.)
29. Langer R. E., Phys. Rev. 51, 669 (1937).
30. Kemble E. C., The Fundamental Principles of Quantum Mechanics, New York, 1937.
31. Rasetti F., Elements of Nuclear Physics, New York, 1936. (Имеется перевод: Ф. Разетти, Основы ядерной физики, Гостехиздат, 1940.)
32. Kennard E. H., Kinetic Theory of Gases, New York, 1938.
33. Whittaker E. T. and Watson G. N., Modern Analysis, 3d ed., London, 1920. (Имеется перевод: Э. Т. Уиттекер и Г. Н. Ватсон, Курс современного анализа, ч. 1 и 2, ГТТИ, 1933 и 1934.)
34. Bethe H., Rev. Mod. Phys. 9, 75 (1937). (Имеется перевод: Г. Бете, Физика ядра, ч. 2, Гостехиздат, 1948.)
35. Wigner E. P., Phys. Rev. 70, 607 (1946).
36. Feshbach H., Reaslee D. C. and Weisskopf V. F., Phys. Rev. 71, 145 (1947).
37. Schrödinger E., Proc. Roy. Irish. Acad. A47, 53 (1942).
38. Slater and Frank, Introduction to Theoretical Physics, New York, 1933.
39. Corson E. T., Theory of Functions of a Complex Variable, London, 1930.
40. White H. E., Introduction to Atomic Spectra, New York, 1934.
41. Wigner E., Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren, Braunschweig, 1931. (Имеется перевод: Е. Вигнер, Теория групп, ИЛ, 1961.)
42. Whittaker E. T., A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies, London, 1927. (Имеется перевод: Э. Т. Уиттекер, Аналитическая динамика, ОНТИ, 1937.)
43. Goldstein H., Classical Mechanics, Cambridge, 1950. (Имеется перевод: Г. Гольдштейн, Классическая механика, Гостехиздат, 1957.)
44. Condon E. U. and Shortley G. H., The Theory of Atomic Spectra, New York, 1935. (Имеется перевод: Е. Кондон и Г. Шортли, Теория атомных спектров, ИЛ, 1949.)
45. Herzberg G., Atomic Spectra, New York, 1937. (Имеется перевод: Г. Герцберг, Атомные спектры и строение атомов, ИЛ, 1948.)
46. Sommerfeld A., Atombau und Spektrallinien, Braunschweig, 1939. (Имеется перевод: А. Зоммерфельд, Строение атома и спектры, т. I и II, Гостехиздат, 1956.)
47. Margenau H., Rev. Mod. Phys. 11, 1 (1939).
48. Pauling L., The Nature of the Chemical Bond, Ithaca, New York, 1940. (Имеется перевод: Л. Паулинг, Природа химической связи, Госхимиздат, 1947.)
49. Mitchell A. C. and Zemansky M. W., Resonance Radiation and Excited Atoms, New York, 1934. (Имеется перевод: А. Митчелли и М. Земанский, Резонансное излучение и возбужденные атомы, ОНТИ, 1937.)
50. Morse P. M., Rev. Mod. Phys. 4, 577 (1932).
51. Pauli W., Rev. Mod. Phys. 13, 203 (1941). (Имеется перевод: В. Паули, Релятивистская теория элементарных частиц, ИЛ, 1947.)
52. Mott N. F. and Jones H., Theory of Properties of Metals and Alloys, London, 1936.

53. Kellogg J. B. M. and Millman S., Rev. Mod. Phys. 18, 323 (1946). (Имеется перевод: УФН 34, 72 (1948).)
54. Zener C., Phys. Rev. 37, 556 (1931).
55. Stueckelberg E., Helv. Physica Acta 5, № 6, 369 (1932).
56. Bohr N., Phil. Mag. 25, 10 (1913).
57. Rayleigh, Theory of Sound, 2d ed., London, 1894—1896. (Имеется перевод: Дж. В. Стретт (лорд Рэлей), Теория звука, Гостехиздат, 1955.)
58. Watson, Bessel Functions, London, 1922. (Имеется перевод: Д. Ватсон, Теория бесселевых функций, ИЛ, 1949.)
59. Bethe H. A., Rev. Mod. Phys. 8, 117—118 (1936).
60. Bethe H. A., Phys. Rev. 76, 38 (1949).
61. Blatt J. M. and Jackson J. D., Phys. Rev. 76, 38 (1949).
62. Bethe H. A. and Bacher R. F., Rev. Mod. Phys. 8, 82 (1936).
63. Neumann J., Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik, Berlin, 1932.
64. Szilard L., Zs. Phys. 53, 840 (1929).
65. Brillouin L., American Scientist 38, 594 (1950).
66. Einstein, Rosen and Podolsky, Phys. Rev. 47, 777 (1935). (Имеется перевод: УФН 16, 440 (1936).)
67. Bohr N., Phys. Rev. 48, 696 (1935). (Имеется перевод: УФН 16, 446 (1936).)
68. Furry W. H., Phys. Rev. 49, 393, 476 (1936).
- 69.* Bohm D., Phys. Rev. 85, 166 and 180 (1952). (Имеется перевод в сб. «Вопросы причинности в квантовой механике», ИЛ, 1955, стр. 34 и 65.)
- 70.* Bohm D., Causality and Chance in Modern Physics, London, 1957. (Имеется перевод: Д. Бом, Причинность и случайность в современной физике, ИЛ, 1959.)
- 71.* Шпольский Э. В., Атомная физика, т. I и II, Гостехиздат, 1951.
- 72.* Левич В. Г., Введение в статистическую физику, Гостехиздат, 1954.
- 73.* Иоффе А. Ф., Элементарный фотоэлектрический эффект, СПб, 1913.
- 74.* Лукирский А., Прилежаев С., Zs. Phys. 49, 239 (1928).
- 75.* Ахиезер А. И. и Берестецкий В. Б., Квантовая электродинамика, Физматгиз, 1960.
- 76.* Ландау Л. и Лифшиц Е., Теория поля, 3-е изд., Физматгиз, 1960.
- 77.* Ландау Л. и Лифшиц Е., Квантовая механика, ч. I, Гостехиздат, 1948.
- 78.* Блохинцев Д. И., Основы квантовой механики, Гостехиздат, 1949.
- 79.* Мандельштам Л. И., Собрание сочинений, т. V, Изд. АН СССР, 1951.
- 80.* Мандельштам Л. И. и Тамм И. Е., Изв. АН СССР, сер. физич. 9, 122 (1945)
- 81.* Фок В. А. и Крылов Н. А., ЖЭТФ 17, 93 (1947).
- 82.* Биберман Г. А., Сушкин Н. Г. и Фабрикант В. А., ДАН СССР 16, 185 (1949).
- 83.* Энгельс Ф., Анти-Дюринг, Госполитиздат, 1953, стр. 113.
- 84.* Ленин В. И., Философские тетради, Госполитиздат, 1947.
- 85.* Ландсберг Г. С., Оптика, Гостехиздат, 1957.
- 86.* Френкель Я. И., Zs. Phys. 49, 31 (1928).
- 87.* Дорфман Я. Г., Zs. Phys. 23, 286 (1923).
- 88.* Einstein A., Philosopher-Scientist, New York, 1951. Имеется перевод двух статей этого сборника: Н. Бор, Дискуссии с Эйнштейном о теоретико-познавательных проблемах в атомной физике; А. Эйнштейн, Ответ на критику, — в книге «Философские вопросы современной физики», Изд. АН СССР, 1959.)

- 89.* Фок В. А., УФН 62, 461 (1957).
- 90.* Albertson J., Am. J. Phys. 29, 478 (1961).
- 91.* Margenau H., Hill R. N., Progr. Theor. Phys. 26, 722 (1961).
- 92.* Mould R. A., Ann. of Phys. 17, 404 (1962).
- 93.* Wakita H., Progr. Theor. Phys. 25, 32 (1960); 27, 139, 1156 (1962).
- 94.* Daneri A., Loinger A., Prosperi G. M., Nucl. Phys. 33, 297 (1962).
- 95.* Wigner E., Am. J. Phys. 31, 6 (1963).
- 96.* Albertson B., J. Phys. Rev. 129, 940 (1963).
- 97.* Shimony A., Am. J. Phys. 31, 755 (1963).
- 98.* Aharonov Y., Bergmann P. G., Leibowitz J. L., Phys. Rev. 134, 1410 (1964).

* Звездочкой отмечена литература, добавленная при переводе.

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Абсолютно черное тело 15
- — —, равновесное излучение 14, 53
- — —, распределение энергии 31
- Адиабатическое включение потенциала 521
- возмущение 573
- —, примеры 579—586
- приближение 548
- Адиабатической инвариантности критерий 582
- Альфа-распад ядра 287
- —, коэффициент прозрачности барьера 288
- —, приближение ВКБ 289
- —, среднее время жизни ядра 288
- Анализ и синтез 199
- Антисимметричность волновых функций электронов 564
- Атом водорода 390, 392, 473
- —, вырождение энергетических уровней 406
- —, общая форма решения 394
- —, точное решение 402—405
- —, энергетические уровни 405
- Атомный структурный фактор 633
- Бесселя функции 646
- —, асимптотическая форма 644
- Бета-распад, испускание электронов из ядра 587
- Бибермана, Сушкина и Фабриканта опыты 144, 165
- Бюо — Савара закон 563
- Бозе — Эйнштейна статистика 572
- Бора магнетон 418
- Бора — Зоммерфельда квантовое условие 57, 60, 90 и д.
- Борновское приближение 613—618, 629
- — в оптике 629
- —, критерий применимости для прямоугольной потенциальной ямы 637
- —, неприменимость при рассеянии на ядрах 638
- —, применение к случаю экранированного кулоновского рассеяния 635, 636
- —, рассеяние от кристаллической решетки 632—634
- —, связь с коэффициентами разложения потенциала в ряд Фурье 619
- —, условие применимости 634
- Боровский радиус 60
- Брэгга — Вульфа уравнение 91
- условия 633
- Ван-дер-Ваальса сила 547—553, 555, 583
- Вариации постоянных метод 472—475, 588
- Вековое (секулярное) уравнение 431
- Векторный потенциал 17, 414
- — и интенсивность излучения 488
- — плоской волны 107
- —, разложение в ряд Фурье 22
- Вероятность 103
- , плотность 103, 104, 106, 240
- , сохранение 104
- , ток 105, 123
- Вещественность средних значений и порядок сомножителей 222
- Вильсона камера 147, 148, 199
- —, волномеханическое объяснение следов 167—169
- Вина закон 15
- Виртуальный, или метастабильный, уровень 310, 337, 347
- ВКБ приближение 88, 275, 313 и д.
- — в трехмерном случае 318
- —, виртуальные, или метастабильные, состояния 334, 337
- — как асимптотическое разложение 316
- —, проникновение через барьер 320—327
- —, радиоактивный распад 328
- —, связанные состояния потенциальной ямы 331
- —, холодная эмиссия электронов из металла 327, 328
- Возмущение волновых функций стационарного состояния 523
- Возмущений теория 473, 479, 613
- — и теория внезапных переходов 588
- —, применения 529
- Волновая функция 90, 96 и д.
- —, вещественная 109, 111
- —, влияние процесса наблюдения 149
- —, двух частиц 211
- —, комплексная 107, 111
- —, критерий пригодности 216
- —, матричное представление в виде столбца 428, 429
- —, полная, интерпретация с помощью статистического ансамбля волновых функций только спина 690—692
- Волновое уравнение 93 и д.
- — в трех измерениях 363
- — для двух взаимодействующих частиц 251
- — — свободной частицы 100
- —, приближенное решение 317
- Волновой вектор 22
- пакет 79 и д.
- —, вблизи резонанса 343
- —, образование 341, 402
- —, расплывание для свободной частицы 243
- —, скорость групповая 84, 101
- —, — сигнала 84

Волновой пакет, скорость фазовая 84
 — формализм и вероятность 210
 Волновые и корпускулярные свойства вещества как потенциальные возможности 697
 — пакеты как континуум собственных функций 305
 — функции гармонического осциллятора 425
 Вырожденный оператор 254

Гамильтона оператор 237, 268, 274 и д.
 —, собственные функции 270, 272, 276
 — уравнения 26
 — функция 236, 304, 365, 414
 Гамильтона — Якоби уравнение 319
 Гамильтониан в сферических координатах 365
 —, влияние спина 562—564
 — заряженной частицы в электромагнитном поле 414
 — — — — — квантовомеханический 415
 Гармонический осциллятор 331, 348—362
 —, волновое уравнение 348
 —, —, методы точного решения 350
 —, —, —, общая форма решений 349
 —, —, —, шрёдингеровский метод факторизации 350
 —, —, потенциал 331
 —, —, трехмерный 409, 497, 543
 —, —, вырождение энергетических уровней 411, 535
 —, —, уравнения Шрёдингера 410
 Гаусса функция нормированная 255
 — распределения 249
 Гауссовская волновая функция 250
 —, —, особые свойства 250
 Гипергеометрическая функция 663
 — — вырожденная 407
 Градиентная инвариантность 416, 417
 Градиентное преобразование 18, 416, 417
 —, исключение скалярного потенциала 417
 —, —, однородное магнитное поле 417
 Грина теорема 626
 — функция 626
 —, —, свойства 626
 Гюйгенса принцип 149, 159, 211

Де Бройля волны 77, 78, 90, 139
 — — длина волны 189, 304, 313
 — — соотношение 46, 50, 78 и д.
 Действия переменная 335, 578
 — функция 317, 319
 Дейтрон 302, 305
 —, уровни энергии 394
 —, энергия связи 302
 Детерминизм классический 39
 Диагональное представление операторов 426
 Дирака дельта-функция 256, 263, 427
 —, дифференцирование 259
 —, —, нормировка 256, 428
 —, —, разложение в ряд 265
 —, —, релятивистское волновое уравнение 113, 470
 Дискретность квантовых процессов 39
 Доплеровское смещение 49 и д.
 Дополнительности принцип 193—196, 209
 Дуализм корпускулярно-волновой 173, 174
 Дэвиссона — Джермера опыт 78, 91 и д.
 —, —, объяснение Дьюэна 92, 164

Естественная ширина линии 272

Закон сохранения энергии 283
 Зеемана эффект 407, 419, 450, 518
 — — аномальный 515
 — — нормальный 513
 — — —, квантовое описание 514
 Зеемановское расщепление энергетических уровней 417
 Зенона парадоксы 180

Излучение индуцированное, или вынужденное 491, 492
 — магнитное дипольное 505
 — —, правила отбора 506
 — самопроизвольное 492
 — — по Эйнштейну 492
 — электрическое квадрупольное 504
 — —, правила отбора 505
 Измерение мгновенное 677
 —, необратимость и роль его в квантовой теории 696
 —, разрушение интерференционной картины 687
 — — спина атома 679
 Измерительная аппаратура 668
 —, классические свойства 669—671
 —, —, ошибка измерения 669
 —, —, связь с состоянием системы 669
 Импульс 189, 190, 191
 — отдельной частицы 188
 — света («угл волн») 78
 — силы 188
 Импульсное представление 219
 Интерференция вероятностей 269
 Ионизации потенциал 63
 Испускание излучения 72

Калибровочное, или градиентное, преобразование 18
 Канонически сопряженные переменные 195
 Канонические уравнения 414
 Канонический импульс 414
 Каноническое преобразование 386, 544
 Квадрупольный момент заряда 504
 Квантование атомных систем 53
 — момента количества движения 57
 — осцилляторов вещества 32
 — — излучения 30
 — — электрона в атоме водорода 58
 Квантовое состояние 213, 214, 691
 —, —, статистический смысл 213
 — число азимутальное 63, 372
 — — главное 61, 398, 400
 — — магнитное 372, 400, 418
 — — орбитальное 372, 400
 — — полного момента 372
 — — радиальное 61
 Квантовомеханическая аналогия фазы осциллятора 553
 Квантовомеханический резонанс 541
 Квантовый переход 477
 Кватернион 460
 Кейли — Клейна параметры 460
 Керра эффект 40
 — ячейка (конденсатор) 40
 Классический предел квантовой теории 312 и д.
 Колебания вынужденные 520
 — свободные 520
 Коммутативность диагональных матриц 426

Коммутатор 221, 231, 438, 445
 — двух матриц 422
 Коммутация матриц 422
 Комптона эффект 47 и д.
 Комптоновская длина волны электрона 48
 Константы движения 367
 Координатное представление 219, 221, 222
 Корреляция 240, 241
 —, квантовое определение 243
 —, количественная мера в классической теории 242
 —, физическое описание причин 708—712
 Кронекера символ 423
 Кулоновский потенциал 392, 396
 —, специфические свойства 638
 —, сравнение классического и борновского приближений 637, 638
 Кюри точка 566

Лагерра полиномы 407
 — присоединенные полиномы 407
 Лапласа оператор 18, 19, 363
 — уравнение 19
 Лармора прецессия 513
 — частота 513, 582
 Лауренса и Бимса опыт 40
 Лебедева опыт 46
 Лежандра полиномы 375, 388, 641, 646
 —, дифференциальное уравнение 376
 —, нормировка 376
 —, ортогональность 376
 —, постулат разложения 377
 —, производящая функция 377
 —, рекуррентные формулы 377
 —, узлы 378
 — присоединенные функции 378
 —, дифференциальное уравнение 379
 —, нормировка 379
 —, общая форма 380
 —, поверхностные гармоники 379
 —, число узлов 381
 Линейное преобразование 429
 Линейной суперпозиции гипотеза 211, 232
 Линейность операторов 220
 Лоренца преобразование 112

Магнетомеханическое отношение 450
 Максвелла уравнения 17 и д.
 Максвелла — Больцмана распределение скоростей 28
 — статистика 493
 Максвелловский «демон» 696
 Матрица 420
 —, диагональная 423
 —, единичная 423
 —, обратная 424
 —, свойства 421
 —, след, или шпур 436
 —, унитарная 433
 —, элемент, или компонента 421
 —, эрмитовская 425
 —, эрмитовски сопряженная 425
 Матрицы, собственные векторы 431
 —, значения 431

Матричная формулировка квантовой теории 420
 Матричное представление квантомеханических операторов 424
 Метастабильное ядро 346, 347
 Метастабильные (виртуальные) состояния микрочастицы в потенциальной яме 309, 334

Микроскоп оптический 130, 283
 — протонный 138, 165
 — электронный 130, 135
 Микроскопическая обратимость квантовых процессов 482
 — классических движений 482
 Многих частиц задача 250
 Момент количества движения 363, 450
 — — в полярных координатах 366
 — —, оператор 363, 365
 — —, —, перестановочные соотношения 365
 — —, —, сложение 461
 Мотта формула рассеяния 666

Невырожденный оператор 255
 Неопределенностей соотношение 81, 97, 124 и д.
 — для электронов 125
 — — энергии и времени 125, 133
 — — и некоторые формы нашего мышления 205
 — —, общий вывод 246
 — —, объяснение энергетических уровней 303
 Неопределенности принцип 124
 Непрерывность движения частиц в классической физике 177
 — и дискретность квантовых представлений 698, 699
 Непрерывные матрицы 426
 Неразличимость эквивалентных частиц 570—572
 Неунитарное преобразование 434
 Ньютона законы движения 13, 41, 43, 234
 — уравнения 238, 313

Обменная энергия 559, 565, 567
 Обменное вырождение 555—557, 559
 Обменный интеграл 559
 Оператор 210, 232
 — антиэрмитовский 227
 — в пространстве импульсов 219
 — — координат 219
 — вырожденный 254
 — для вычисления средних значений импульса 217
 —, линейность 220
 —, матричное представление 420
 — момента количества движения 363, 365
 — — —, матричное выражение 451
 — — —, собственные значения 368, 369
 — — —, функции 368, 369, 373
 —, невырожденный 255
 —, представление через собственные функции 266
 —, собственная функция 252
 —, собственное (характеристическое) значение 252
 —, среднее значение 430
 —, эрмитизация 225
 —, эрмитовски сопряженный 226—230
 — —, обобщенное определение 229
 —, эрмитовский 223
 —, обобщенное определение 228
 —, ортогональность собственных функций 263
 —, теорема о вещественности собственных значений 263
 Операторная форма функций общего вида 221
 Ортоводород 659

- Ортогональности условия 21
 Ортогональность 21, 430
 Осциллятор ангармонический 55
 — гармонический 24, 25, 55
 — —, гамильтониан 25
 — излучения 17, 417
- Параводород 659
 Параметр столкновения, или удара 592, 595, 608
 Парциальная волна 641
 Парциальных волн метод 641
 — — — для свободной частицы 643—647
 — — —, интерпретация для p -волн 645
 — — —, — — s -волн 644
 — — —, применение для случая ядерного рассеяния 655—662
 — — —, случай кулоновского потенциала 642, 662
 Паули матрицы 455
 — — —, перестановочные соотношения 455
 — принцип запрета 558, 565, 569
 Паули — Вайскопфа метод 114
 Пашена — Бака эффект 419
 Переменная действия 56
 Переход виртуальный 481, 486
 — действительный 481
 Планка гипотеза 30, 36, 38
 — постоянная 16, 36
 — функция распределения 31, 69
 Плотность вероятности 103 и д.
 — — для кванта света 114, 115
 Поглощение излучения 67
 Пойнтинга вектор 114, 488
 Полная система наблюдаемых величин 438
 Полное внутреннее отражение 283, 341
 Полностью симметричные волновые функции 569
 Полный момент количества движения 366, 372
 — — —, векторное изображение 372
 Поляризации направление 23
 Поляризация круговая 511
 — эллиптическая 511
 Поляризуемость атомов 532—534, 550
 Поперечное сечение для гауссовского потенциала и прямоугольной ямы 620
 — — передачи энергии и импульса 599
 — — рассеяния 590, 591
 — — — дифференциальное 593
 — — —, зависимость от угла рассеяния 591
 — — — полное 592, 593
 Потенциал прямоугольный 277, 278
 — —, коэффициент прозрачности барьера 280
 — —, отражательная способность барьера 280
 Потенциальный барьер 196
 Правила отбора 470, 498
 — — дипольных переходов 503
 — — для гармонического осциллятора 498
 — — сферически симметричного потенциала без учета спина 501
 — — — четности 500
 — —, связь с принципом соответствия 498
 Правило сумм для вычисления матричных элементов 510
 Представление гамильтоновое 441
 — гейзенберговское 441, 442
 — импульсное 219
 — координатное 219
 — Шрёдингера 442
 — энергетическое 441
 Преобразование каноническое 436
- Приведенная масса 394, 418, 604
 — энергия 604
 Прицельное расстояние 592
 Причинность и механический детерминизм 183
 — механическая (динамическая) 39
 — приближенная и статистическая 185
 Проникновение через барьер 285
 — — —, коэффициент отражения 287
 — — —, — —, прозрачности 286
 Прямоугольная потенциальная яма 289
 — — —, коэффициент отражения 292
 — — —, — —, прозрачности 291, 292
 Прямоугольный потенциальный барьер 276
 Пуассона скобки 444—446
 — уравнение 18, 19
- Работа 186
 — выхода 327
 Равномерное распределение энергии по степеням свободы 29
 Радиальное уравнение 390, 412, 418
 Различия между классическими и квантовыми законами 39
 Разложение δ -функции 358
 — произвольной функции в ряд по собственным функциям 262
 Разложения постулат 263, 268, 358, 436
 — —, применение к оператору Гамильтона для прямоугольной потенциальной ямы 301
 Рамзауэра эффект 293, 653, 654
 Рассеяние в координатном представлении 623
 — — — и импульсном представлении 629, 630
 — кулоновское 601
 — на экранированном кулоновском потенциале 618
 Рассеяния теория квантовая 607
 — — классическая 589
 — — —, условие применимости 607
 — угол 592
 Резерфорда формула 601, 602, 618
 Резонанс прозрачности 293, 338, 654
 — —, ширина 292, 338
 Резонансный переход энергии 552
 Релятивистские теории 112
 Ридберга постоянная 60
 Ридберга — Ритца комбинационный принцип 54, 75
 Рэлея — Джинса закон 14 и д.
- Свет, волновая природа 37, 38
 — —, корпускулярные свойства 45
 — —, локализованные частицы 37, 38
 Световая волна 36
 Свободного пробега распределение длин 591
 — — средняя длина 590
 s -волны 391, 644
 —, общая форма решения 395
 Связанное состояние 294, 301
 — — в прямоугольной потенциальной яме 349
 — —, энергия связи 302
 Сила 190
 Сиглетное состояние дейтрона 310
 Скалярный потенциал 17, 414
 Скрытые параметры 43, 127, 207
 — —, их существование 142
 — —, несовместимость их с квантовой теорией 712

Слейтера детерминант 568, 569
 Сложение моментов количества движения 461
 — — — — —, общая задача 469
 — орбитального и спинного моментов 466
 — спинов 462
 Собственные значения в координатном пространстве 253
 — — — — —, оператор x 255
 — — — — —, — импульса 253
 — — — — —, — энергии 254
 — оператора x в импульсном представлении 258
 — — импульса в пространстве импульсов 257
 — операторов, дискретный и непрерывный спектр 261
 — функций в координатном пространстве 253
 Соответствия принцип 43—45 и д.
 — — и теория излучения 66
 — —, квантование моментов количества движения 58
 Соотношение между квантовым и классическим представлениями 714
 Состояние квантовое 213, 214, 691
 — —, статистический смысл 213
 — системы в квантовой теории 212
 — смешанное 691, 692
 — чистое 691, 692
 Состояния виртуальные, или метастабильные 334
 — истинные связанные 334
 Сохранения вероятности 104, 415
 — энергии закон 239
 Спин 210, 450
 — электрона 112, 211, 450
 — —, связь с обменной энергией 565
 Спинор 95, 460
 — —, преобразование 457
 Спин-орбитальная энергия 471
 Спин-орбитальное взаимодействие 471
 Сравнение электронных и электромагнитных волн 95
 Среднее значение функции импульса 215
 — — — координат 214
 Средняя скорость 179
 Статистические законы 186
 Статистический вес 29
 Стационарное состояние 271
 Столкновения второго рода 584
 Ток вероятности 105, 123, 415, 417
 — —, вектор 106
 — —, общее определение 238
 Томаса прецессия 470
 Томсона формула 48
 Тонкая структура 406
 Тяготения закон 185
 Узлы волновой функции 333
 Унитарное преобразование 433, 442, 460
 — —, свойства 433—436

Фабри — Перо интерферометр 291
 Фазовый интеграл 57
 Факторизации метод 350, 403
 Ферми — Дирака статистика 572
 Ферромагнетизм 567
 Физическая эквивалентность всех систем координат 385
 Флуктуации 240

Фотон 45, 134, 135
 Фотоэлектрический эффект 35, 53, 172
 Франка — Герцга опыты 38, 65
 Функция антисимметричная 557
 — симметричная 557
 Фурье интеграл 99, 217, 426
 — интегральная теорема 100
 — ряд 99, 264
 — —, метод разложения 13, 16, 17
 — —, разложение полей 20

Характеристическая функция 252
 Характеристическое значение оператора 252—

Центробежный потенциал 391, 395
 Циклотронная частота 513
 Цуг волн 78, 132, 134

Четность 499

Шаровые функции 363, 364
 Шварца неравенство 247, 248, 249
 Шмидта ортогонализация 437
 Шрёдингера уравнение 60 и д.
 — — — в импульсном представлении 613
 — — — координатном представлении 440
 — — — произвольном представлении 439
 — — — сферических полярных координатах 363
 — — — для свободной частицы 101, 149, 393
 — — — электрона 107
 — —, общая форма 232
 — — трехмерное 318
 Штарка эффект 472, 535, 550
 — — в атомах водорода 545, 663
 — — —, отличных от атомов водорода 531
 — — — квадратичный 532, 545
 — — — первого порядка 406, 544
 — — — —, классическая интерпретация 546
 Штерна и Герлаха двойной опыт 385
 — — — опыт 381 и д.

Эйнштейна и де Бройля соотношение 50, 51
 — — Дебая теория теплоемкостей твердых тел 172
 —, Розена, Подольского мысленный эксперимент 702—704
 — — — — —, математический анализ 704—708
 — — — — —, парадокс 700—702
 — — — условие 486
 Электронные волны 88
 Энергия 189
 — кинетическая 187
 — потенциальная 187
 Энтропия и ее связь с процессом измерения 696
 Эренфеста теорема 236
 Эрмита — Чебышева полиномы 354, 377
 — —, порождающая функция 355
 — —, рекуррентные соотношения 356
 — —, свойство ортогональности 357
 — —, связь со сферическими гармониками 412
 Эффективный атомный радиус 594
 — потенциал 399, 418

Опечатки

Стр.	Строка	Напечатано	Следует читать
372	7 сн.	$(\bar{L})^2$	$(\bar{L}_x)^2$
	6 сн.	$(\bar{L})^2$	$(\bar{L}_y)^2$
433	1 сн.	C_{ρ}^{*}	$C_{\rho}'^*$
434	3 сн.	$'C^*$	C'^*
447	16 сн.	μ_b	φ_b
456	12 сн.	ψ_1 и ψ_2	ψ_+ и ψ_-
618	16 св.	$\frac{d\mathbf{r}}{r}$	$\frac{dr}{r}$