***От редактора перевода***

Мы хотели бы добавить к извинениям автора еще одно.

В вып. 5, на стр. 107, имеется ошибка, требующая исправ­ления. Там сказано, что «никакое статическое распределение заряда внутри замкнутого сплошного проводника (подразу­мевается, конечно, в полости.— *Ред.)* не может создать поле вне его. Защита действует в обе стороны!» Авторы должны были бы оговорить, что поле вне оболочки (при любом ста­тическом распределении зарядов внутри ее) отсутствует лишь в том случае, если последняя заземлена. Аналогичное заме­чание относится и к последующему утверждению авторов о независимости электрических полей по обе стороны сплош­ной проводящей оболочки и к рассуждениям на стр. 121.

***Глава 11***

**РАСПРОСТРАНЕНИЕ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ**

[**§ 1. Состояния электр****она в одномерной ре****шетке**](#a1)

[**§ 2. Сост****ояния оп****ределенной энергии**](#a2)

[**§ 3. Сос****тояния, зависящие от вр****емени**](#a3)

[**§ 4. Электр****он в трехмер****ной решетке**](#a4)

[**§ 5. Другие с****остояни****я в решетке**](#a5)

[**§ 6. Рассеяние** **на не****регулярностях решетки**](#a6)

[**§ 7. Захва****т нерегулярностя****ми р****ешетки**](#a7)

[**§ 8. Амплит****уды расс****еян****ия и связанные состояния**](#a8)

**§ 1. Состояния электрона в одномерной решетке**

На первый взгляд вам может показаться, что обладающий небольшой энергией электрон с превеликим трудом протискивается через твердый кристалл. Атомы в нем уложены так, что их центры отстоят один от другого лишь на несколько ангстрем, а эффективный диаметр атома при рассеянии электронов составляет примерно 1Å или около этого. Иначе говоря, атомы, если их сравнивать с промежутками между ними, очень велики, так что можно ожидать, что средний свободный пробег между столкновениями будет порядка нескольких анг­стрем, а это практически равно нулю. Следует ожидать, что электрон почти тотчас же влетит в тот или иной атом. Тем не менее перед нами самое обычное явление природы: когда решетка идеальна, электрону ничего не стоит плавно пронестись сквозь кристалл, почти как сквозь вакуум. Странный этот факт — причина того, что металлы так легко проводят электричество; кроме того, он позволил изобрести множество весьма полезных устройств. Например, благо­даря ему транзистор способен имитировать радиолампу. В радиолампе электроны движутся свободно через вакуум, в транзисторе они тоже движутся свободно, но только через кристал­лическую решетку. Механизм того, что проис­ходит в транзисторе, будет описан в этой главе; следующая глава посвящена применениям этих принципов в различных практических уст­ройствах.

Проводимость электронов в кристалле — один из примеров очень общего явления. Через кристаллы могут странствовать не только электроны, но и другие «объекты». Так, атомные возбуждения тоже могут путешествовать аналогичным способом. Явление, о котором мы сейчас будем говорить, то и дело возникает при изучении физики твердого состояния.

Мы уже неоднократно разбирали примеры систем с двумя состояниями. Представим себе на этот раз электрон, который может находиться в одном из двух положений, причем в каждом из них он оказывается в одинаковом окружении. Предположим также, что имеется определенная амплитуда перехода электрона из одного положения в другое и, естественно, такая же ампли­туда перехода обратно, в точности, как в гл. 8, § 1 (вып. 8) для молекулярного иона водорода. Тогда законы квантовой механики приводят к следующим результатам. У электрона возникнет два возможных состояния с определенной энергией, причем каждое состояние может быть описано амплитудой того, что электрон пребывает в одном из двух базисных положений. В каждом из состояний определенной энергии величины этих двух амплитуд постоянны во времени, а фазы меняются во вре­мени с одинаковой частотой. С другой стороны, если электрон сперва был в одном положении, то со временем он перейдет в другое, а еще позже вернется в первое положение. Изменения амплитуды похожи на движение двух связанных маятников.

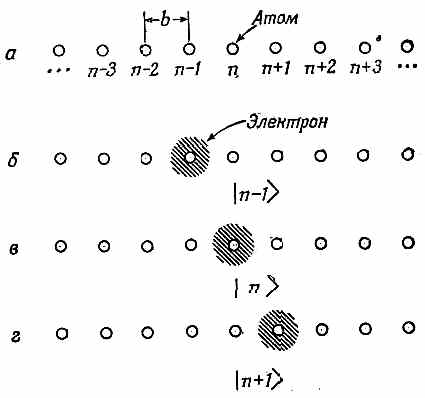
Рассмотрим теперь идеальную кристаллическую решетку и вообразим, что в ней электрон может расположиться в неко­торой «ямке» возле определенного атома, имея определенную энергию. Допустим также, что у электрона имеется некоторая амплитуда того, что он перескочит в другую ямку, которая на­ходится неподалеку, возле другого атома. Это чем-то напоминает систему с двумя состояниями, но с добавочными осложнениями. После того как электрон достигает соседнего атома, он может перейти в совершенно новое место или вернуться в исходную позицию. Все это похоже не столько на *пару* связанных маят­ников, сколько на *бесконечное множество* маятников, связанных между собой. Это чем-то напоминает одну из тех машин (со­ставленных из длинного ряда стержней, прикрепленных к за­крученной проволоке), с помощью которых на первом курсе демонстрировалось распространение волн.

Если у вас имеется гармонический осциллятор, связанный с другим гармоническим осциллятором, который в свою оче­редь связан со следующим осциллятором, который и т.д..., и если вы создадите в одном месте какую-то нерегулярность, то она начнет распространяться, как волна по проволоке. То же самое возникает и в том случае, если вы поместите электрон возле одного из атомов в длинной их цепочке.

Как правило, задачи по механике легче всего решать на языке установившихся волн; это проще, чем анализировать послед­ствия отдельного толчка. Тогда появляется какая-то картина смещений, которая распространяется по кристаллу, как волна с заданной, фиксированной частотой. То же самое происходит с электроном, и по той же причине, потому что электрон описывается в квантовой механике похожими уравнениями.

Но нужно помнить одну вещь: амплитуда для электрона быть в данном месте это *амплитуда,* а не вероятность. Если бы электрон просто просачивался из одного места в другое, как вода через дырочку, то его поведение было бы совсем иным. Если бы, скажем, мы соединили два бачка с водой тоненькой трубоч­кой, по которой вода из одного бачка по капле перетекала в другой, то уровни воды выравнивались бы по экспоненте. С электроном же происходит просачивание амплитуды, а не монотонное переливание вероятностей. А одно из свойств мнимого члена (множителя *i* в дифференциальных уравнениях квантовой механики) — что он меняет экспоненциальное реше­ние на колебательное. И то, что после этого происходит, ничуть не походит на то, как вода перетекает из одного бачка в другой.

Теперь мы хотим квантовомеханический случай проанали­зировать количественно. Пусть имеется одномерная система, состоящая из длинной цепи атомов (фиг. 11.1,а).



*Фиг. 11.1. Базисные состояния электрона в одномерной решетке.*

(Кристалл, конечно, трехмерен, но физика в обоих случаях очень близка; если вы разберетесь в одномерном случае, то сможете разоб­раться и в том, что бывает в трех измерениях.) Мы хотим знать, что случится, если в эту линию атомов поместить отдельный электрон. Конечно, в реальном кристалле таких электронов мириады. Но большинство их (в непроводящем кристалле почти все) занимает в общей картине движения свое место, каждый вертится вокруг своего атома, и все оказывается совершенно установившимся. А мы хотим рассуждать о том, что будет, если внутрь поместить *лишний* электрон. Мы не будем думать о том, что делают прочие электроны, потому что будем считать, что на то, чтобы изменить их энергию, потребуется очень много энергии возбуждения. Мы собираемся добавить электрон и соз­дать как бы новый слабо связанный отрицательный ион. Следя за тем, что поделывает *этот лишний* электрон, мы делаем при­ближение, пренебрегая при этом внутренним механизмом атомов.

Ясно, что этот электрон сможет перейти к другому атому, перенося в новое место отрицательный ион. Мы предположим, что (в точности, как и в случае электрона, «прыгавшего» от протона к протону) электрон может с какой-то амплитудой «прыгать» от атома к его соседям с любой стороны.

Как же описывать такую систему? Что считать разумными базисными состояниями? Если вы вспомните, что мы делали, когда у электрона было только две возможные позиции, вы сможете догадаться. Пусть в нашей цепочке все расстояния между атомами одинаковы, и пусть мы их пронумеруем по по­рядку, как на фиг. 11.1,*а*. Одно базисное состояние — когда электрон находится возле атома № 6; другое базисное состоя­ние — когда электрон находится возле № 7, или возле № 8, и т. д.; *n*-е базисное состояние можно описать, сказав, что элект­рон находится возле атома № *п.* Обозначим это базисное со­стояние |*n*>. Из фиг. 11.1 ясно, что подразумевается под тремя базисными состояниями:

C:\Мои документы\gray.jpg

С помощью этих наших базисных состояний можно описать любое состояние |ϕ> нашего одномерного кристалла, задав все амплитуды <*n*|ϕ> того, что состояние |ϕ> находится в одном из базисных состояний, т. е. амплитуду того, что электрон распо­ложен близ данного частного атома. Тогда состояние |ϕ> можно записать в виде суперпозиции базисных состояний:

C:\Мои документы\gray.jpg

Кроме того, мы хотим еще предположить, что когда электрон находится близ одного из атомов, то имеется некоторая ампли­туда того, что он просочится к тому атому, что слева, или к тому, что справа. Возьмем простейший случай, когда счи­тается, что он может просочиться только к ближайшим соседям, а к следующему соседу он сможет дойти в два приема. Примем, что амплитуды того, что электрон перепрыгнет от одного атома к соседнему, равны *iA/h* (за единицу времени).

Изменим на время обозначения, и амплитуду <*n*|ϕ>, свя­занную с *n*-м атомом, обозначим через *Сn.* Тогда (11.1) будет иметь вид

C:\Мои документы\gray.jpg

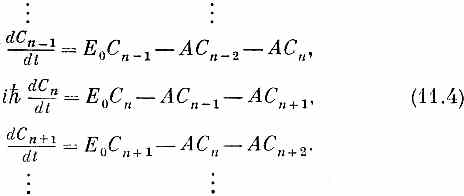
Если бы вы знали каждую из амплитуд *Сn* в данный момент, то, взяв квадраты их модулей, можно было бы получить вероят­ность того, что вы увидите электрон, взглянув в этот момент на атом *п.*

Но что сталось бы чуть позже? По аналогии с изученными нами системами с двумя состояниями мы предлагаем составить гамильтоновы уравнения для этой системы в виде уравнений такого типа:

C:\Мои документы\gray.jpg

Первый справа коэффициент *Е*0физически означает энергию, которую имел бы электрон, если бы он не мог просачиваться от одного атома к другим. (Совершенно неважно, что мы назовем , *Е*0*;* мы неоднократно видели, что реально это не означает ничего, кроме выбора нуля энергии.) Следующий член представляет амплитуду в единицу времени того, что электрон из (*n*+1)-й ямки просочится в *n*-ю ямку, а последний член означает ампли­туду просачивания из (*n*-1)-й ямки. Как обычно, *А* считается постоянным (не зависящим от *t).*

Для полного описания поведения любого состояния |ϕ> надо для каждой из амплитуд *Сn* иметь по одному уравнению типа (11.3). Поскольку мы намерены рассмотреть кристалл с очень большим количеством атомов, то допустим, что состоя­ний имеется бесконечно много, атомы тянутся без конца в обе стороны. (При конечном числе атомов придется специально обращать внимание на то, что случается на концах.) А если ко­личество *N* наших базисных состояний бесконечно велико, то и вся система наших гамильтоновых уравнений бесконечна! Мы напишем только часть ее:



**§ 2. Состояния определенной энергии**

Об электроне в решетке мы теперь уже можем узнать очень многое. Для начала попробуем отыскать состояния определен­ной энергии. Как мы видели в предыдущих главах, это означает, что надо отыскать такой случай, когда все амплитуды меняются с одной частотой, если только они вообще меняются. Мы ищем решение в виде

C:\Мои документы\gray.jpg

Комплексное число *аn* говорит нам о том, какова не зависящая от времени часть амплитуды того, что электроны будут об­наружены возле *n*-го атома. Если это пробное решение подставить для проверки в уравнения (11.4), то получим

C:\Мои документы\gray.jpg

Перед нами бесконечное число уравнений для бесконечного количества неизвестных *аn*! Ситуация тяжелая!

Но мы знаем, что надо только взять детерминант... нет, по­годите! Детерминанты хороши, когда уравнений два, три или четыре. Но здесь их очень много, даже бесконечно много, и вряд ли от детерминантов будет толк. Нет, лучше попробовать решать эти уравнения прямо. Во-первых, пронумеруем *положения* атомов; будем считать, что *n-*йатом находится в *хn,* а *(n+*1)-й— в *хn+*1*.* Если расстояние между атомами равно *b* (как на фиг. 11.1), то *хn+*1*=хn+b.* Взяв начало координат в атоме номер нуль, можно даже получить *хn*=*nb.* Уравнение (11.5) можно тогда переписать в виде

C:\Мои документы\gray.jpg

а уравнение (11.6) превратится в

C:\Мои документы\gray.jpg

Пользуясь тем, что *xn+*1*=xn+b,* это выражение можно также записать в виде

C:\Мои документы\gray.jpg

Это уравнение немного походит на дифференциальное. Оно говорит, что величина *а(х)* в точке *хn* связана с той же физиче­ской величиной в соседних точках *хn±b.* (Дифференциальное уравнение связывает значения функции в точке с ее значениями в бесконечно близких точках.) Может быть, здесь подойдут методы, которыми мы обычно пользуемся для решения диффе­ренциальных уравнений? Попробуем.

Решения линейных дифференциальных уравнений с по­стоянными коэффициентами всегда могут быть выражены через экспоненты. Попробуем и здесь то же самое; в качестве пробного решения выберем

C:\Мои документы\gray.jpg

Тогда (11.9) обратится в

C:\Мои документы\gray.jpg

Сократим на общий множительC:\Мои документы\gray.jpg*;* получим

C:\Мои документы\gray.jpg

Два последних члена равняются *2А*cos*kb,* так что

*E=E0-2Acoskb.* (11.13)

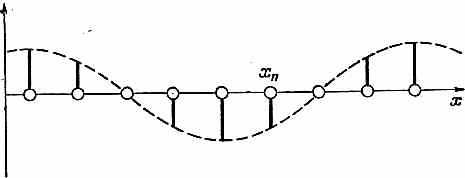
Мы обнаружили, что при *любом* выборе постоянной *k* имеется решение, энергия которого дается этим уравнением. В зависи­мости от *k* получаются различные возможные энергии, и каж­дая *k* соответствует отдельному решению. Решений бесконечно много, но это и не удивительно, ведь мы исходим из беско­нечного числа базисных состояний.

Посмотрим, каков смысл этих решений. Для каждой *k* уравнение (11.10) дает свои *а.* Тогда амплитуды обращаются в

C:\Мои документы\gray.jpg

причем нужно помнить, что энергия *Е* также зависит от *k* в сог­ласии с уравнением (11.13). Множитель дает *пространст­венную зависимость* амплитуд. Амплитуды при переходе от атома к атому колеблются.

При этом имейте в виду, что колебания амплитуды в прост­ранстве *комплексны, модуль* ее вблизи любого атома один и тот же, а фаза (в данный момент) от атома к атому сдвигается на *ikb.* Чтобы можно было видеть, что происходит, поставим у каж­дого атома вертикальную черточку, равную вещественной части амплитуды (фиг. 11.2).



*Фиг. 11.2. Изменение вещественной части Сn с хn.*

Огибающая этих вертикалей (по­казанная штрихованной линией) является, конечно, косинусо­идой. Мнимая часть *Сn —* это тоже колеблющаяся функция, но она сдвинута по фазе на 90° , так что квадрат модуля (сумма квадратов вещественной и мнимой частей) у всех *С* один и тот же.

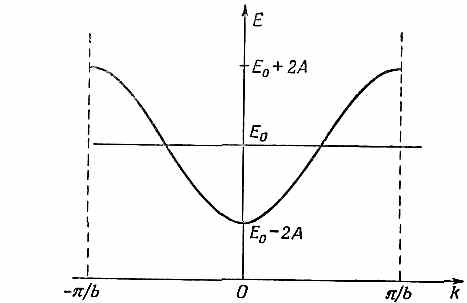
Итак, выбирая *k,* мы получаем стационарное состояние с определенной энергией *Е.* И в каждом таком состоянии элект­рону одинаково вероятно оказаться около любого из атомов, никаких преимуществ у одного атома перед другим нет. От атома к атому меняется только фаза. Фазы меняются еще и со време­нем. Из (11.14) следует, что вещественная и мнимая части распространяются по кристаллу, как волны, как веществен­ная и мнимая части выражения

C:\Мои документы\gray.jpg

Волна может двигаться либо к положительным, либо к отрица­тельным *х,* смотря по тому, какой знак выбран для *k.*

Заметьте, что мы предположили, что поставленное в нашем пробном решении (11.10) число *k* есть число вещественное. Теперь видно, почему в бесконечной цепочке атомов так и долж­но быть. Пусть *k* было бы мнимым числом —*ik'.* Тогда амплитуды *аn* менялись бы, как *,* что означало бы, что амплитуда растет все выше и выше, когда *х* возрастает, или при *k'* отрицательном, когда *х* становится большим отрицательным числом. Такой вид решения был бы вполне хорош, если бы цепочка атомов на чем-то кончалась, но в бесконечной цепи атомов это не может быть фи­зическим решением. Оно привело бы к бесконечным амплиту­дам и, стало быть, к бесконечным вероятностям, которые не могут отражать действительного положения вещей. Позже мы встретимся с примером, когда и у мнимых *k* есть смысл.

Соотношение (11.13) между энергией *Е* и волновым числом *k* изображено на фиг. 11.3.



*Фиг. 11.3. Энергия стационарных состояний как функция параметра k.*

Как следует из этого рисунка, энергия может меняться от *Е*0*-*2*А* при *k*=0 до *Е*0+ *2А* при *k=*±*π*/*/b.* График начерчен для положительных *А,* при отрица­тельных *А* кривую пришлось бы перевернуть, но область изменения осталась бы прежней. Существенно то, что в некоторой области, или «полосе» энергий допустимы любые значения энергии; вне полосы энергии быть не может. Из наших пред­положений следует, что если электрон в кристалле находится в стационарном состоянии, энергия его не сможет оказаться вне этой полосы.

Согласно (11.10), меньшие *k* отвечают более низким энергети­ческим состояниям *Е≈Е*0*-*2*А.* Когда *k* по величине растет (все равно, в положительную или отрицательную сторону), то энергия сперва растет, а потом при *k*=±*π*//*b* достигает ма­ксимума, как показано на фиг. 11.3. Для *k,* больших, чем *π*/*/b,* энергия опять начала бы убывать. Но такие *k* рассматривать не стоит, они не приведут к каким-либо новым состояниям, а просто повторяют те состояния, которые уже появлялись при меньших *k.* Вот как в этом можно убедиться. Рассмотрим со­стояние наинизшей энергии, для которого *k=*0. Тогда при всех *хn* коэффициент *а (хn)* будет один и тот же [см. (11.10)1. Та же самая энергия получилась бы и при *k*= 2*π*/*/b.* Тогда из

(11.10) следовало бы

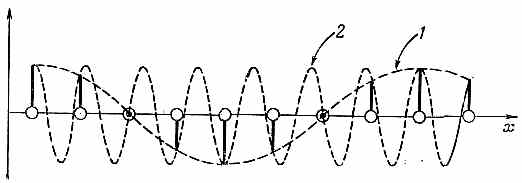
C:\Мои документы\gray.jpg

Но, считая, что начало координат приходится на *х*0*,* можно по­ложить *хn*= *nb,* и тогда *а (хn)* превратится в

C:\Мои документы\gray.jpg

т. е. состояние, описываемое этими *а (хn),* физически ничем не будет отличаться от состояний при *k=*0. Оно не представляет особого решения.

В качестве другого примера возьмем *k=π*/4*b*. Веществен­ная часть *а (хn)* изображена на фиг. 11.4 кривой *1.*



*Фиг. 11.4. Пара значений к, представляющих одну и ту же физическую ситуацию. Кривая 1—для k=π/4b, кривая 2 —для k=7π/4b.*

Если бы *k* было в семь раз больше *(k=7π*/*/4b),* то вещественная часть *а (хn)* менялась бы так, как показано на кривой *2.* (Сама коси­нусоида смысла не имеет, важны только ее значения в *точках хn.*

Кривые нужны просто для того, чтобы было видно, как все меняется.) Вы видите, что оба значения *k* во всех *хn* дают одинаковые амплитуды.

Вывод из всего этого состоит в том, что все возможные реше­ния нашей задачи получатся, если взять *k* только из некоторой ограниченной области. Мы выберем область от -π*/b* до +π/*b* (она показана на фиг. 11.3). В этой области энергия стационар­ных состояний с ростом абсолютной величины *k* возрастает.

Еще одно побочное замечание о том, с чем было бы забавно повозиться. Представьте, что электрон может не только пере­прыгивать к ближайшим соседям с амплитудой *iA/h,* но имеет еще возможность одним махом перепрыгивать и к *следующим за ними* соседям с некоторой другой амплитудой *iB/h.* Вы опять обнаружите, что решение можно искать в форме *ап*=*eikx,* этот тип решений является универсальным. Вы также увидите, что стационарные состояния с волновым числом *k* имеют энер­гию *E*0-2*A*cos *kb-*2*B*cos2*kb.* Это означает, что форма кривой *Е* как функции *k* не универсальна, а зависит от тех частных до­пущений, при которых решается задача. Это не обязательно косинусоида, и она даже не обязательно симметрична относи­тельно горизонтальной оси. Но зато всегда верно, что кривая вне интервала (-π/*b*, π/*b*) повторяется, так что заботиться о других значениях *k* не нужно.

Посмотрим еще внимательнее на то, что происходит при малых *k,* когда вариации амплитуд между одним *хn* и соседним очень маленькие. Будем отсчитывать энергию от такого уровня, чтобы было *Е*0*=*2*А;* тогда минимум кривой фиг. 11.3 придется на нуль энергии. Для достаточно малых *k* можно написать

C:\Мои документы\gray.jpg

и энергия (11.13) превратится в

C:\Мои документы\gray.jpg

Получается, что энергия состояния пропорциональна квадрату волнового числа, описывающего пространственные вариации

амплитуд *Сn.*

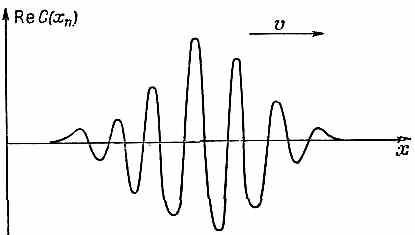
**§ 3. Состояния, зависящие от времени**

В этом параграфе мы хотим подробнее обсудить поведение состояний в одномерной решетке. Если для электрона амплитуда того, что он окажется в *хn,* равна *Сn,* то вероятность найти его там будет |*Сn*|2. Для *стационарных* состояний, описанных уравнением (11.12), эта вероятность при всех *хn* одна и та же и со временем не меняется. Как же отобразить такое положение вещей, кото­рое грубо можно было бы описать, сказав, что электрон определенной энергии сосредоточен в определенной области, так что более вероятно найти его в каком-то одном месте, чем в другом? Этого можно добиться суперпозицией нескольких решений, похожих на (11.12), но со слегка различными значениями *k* и, следовательно, с различными энергиями. Тогда, по крайней мере при *t*=0, амплитуда *Сn* вследствие интерференции раз­личных слагаемых будет зависеть от местоположения, в точности так же, как получаются биения, когда имеется смесь волн раз­ной длины [см. гл. 48 (вып. 4)]. Значит, можно составить такой «волновой пакет», что в нем будет преобладать волновое число *k*0, но будут присутствовать и другие волновые числа, [близкие к](#прим1) *k*0*.*

В нашей суперпозиции стационарных состояний амплитуды с разными *k* будут представлять состояния со слегка различ­ными энергиями и, стало быть, со слегка различными частотами; интерференционная картина суммарного *Сn* поэтому тоже будет меняться во времени, возникнет картина «биений». Как мы ви­дели в гл. 48 (вып. 4), пики биений [места, где *|С(xn)|2* наи­большие] с течением времени начнут двигаться по *х;* скорость их движения мы назвали «групповой». Мы нашли, что эта груп­повая скорость связана с зависимостью *k* от частоты формулой

C:\Мои документы\gray.jpg

все это в равной мере относится и к нашему случаю. Состояние электрона, имеющее вид «скопления», т. е. состояние, для кото­рого *Сn* меняется в пространстве так, как у волнового пакета на фиг. 11.5, будет двигаться вдоль нашего одномерного «кристалла» с быстротой *v,* рапной *dω/dk,* где ω=*E/h*.



*Фиг. 11.5. Вещественная часть С(хn) как функция х для суперпозиции нескольких состояний с близкими энергиями.*

Подстав­ляя (11.16) вместо *Е,* получаем

C:\Мои документы\gray.jpg

Иными словами, электроны движутся по кристаллу с быстротой, пропорциональной самому характерному *k.* Тогда, согласно (11.16), энергия такого электрона пропорциональна квадрату его скорости, *он ведет себя подобно классической частице.* Пока мы рассматриваем все в столь крупном масштабе, что никаких тонкостей строения разглядеть не можем, наша квантовомеханическая картина приводит к тем же результатам, что и клас­сическая физика.

В самом деле, если из (11.18) найти *k* и подставить его в (11.16), то получится

C:\Мои документы\gray.jpg

где *m*эфф — постоянная. Избыточная «энергия движения» элект­рона в пакете зависит от скорости в точности так же, как и у классической частицы. Постоянная *mэфф,* именуемая «эффектив­ной массой», дается выражением

C:\Мои документы\gray.jpg

Заметьте еще, что можно написать

C:\Мои документы\gray.jpg

Если мы решим назвать *mэффv* «импульсом», то этот импульс будет связан с волновым числом *k* так же, как и у свободной частицы.

Не забывайте, что *mэфф* ничего общего не имеет с реальной массой электрона. Она может быть совсем другой, хотя следует сказать, что в реальных кристаллах часто случается, что ее порядок величины оказывается примерно таким же (в 2 или, скажем, в 20 раз больше, чем масса электрона в пустом про­странстве).

Мы только что с вами раскрыли поразительную тайну — как это электрон в кристалле (например, пущенный в германий добавочный электрон) может пронестись через весь кристалл, может лететь по нему совершенно свободно, даже если ему при­ходится сталкиваться со всеми атомами. Это получается оттого, что его амплитуды, перетекая с одного атома на другой, прокладывают ему путь через кристалл. Вот отчего твердое тело может проводить электричество.

**§ 4. Электрон в трехмерной решетке**

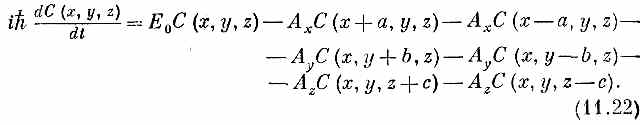
Еще немного о том, как можно применить те же идеи, чтобы понять, что происходит с электроном в трех измерениях. Резуль­таты оказываются очень похожими. Пусть имеется прямоуголь­ная решетка атомов с расстояниями *а, b, с* в трех направлениях. (Если вам больше по душе кубическая решетка, примите все расстояния равными друг другу.) Предположим также, что ам­плитуда прыжка к соседу в направлении *х* есть *iAx*/*h*; ампли­туда прыжка в направлении *у* есть *iAy/h,* а амплитуда прыжка в направлении z есть *iAz/h.* Как же описать базисные состоя­ния? Как и в одномерном случае, одно базисное состояние — это когда электрон находится близ атома с координатами *х, у, z,* где *(х, у, z*) — одна из точек решетки. Если выбрать начало координат в одном из атомов, то все эти точки придутся на

*х=nха, y=nyb и z=nzс,*

где *nх, ny, nz —*три целых числа. Вместо того чтобы ставить при *х, у* и *z* их номера, будем просто писать *х, у,* z, имея в виду, что они принимают лишь такие значения, которые бывают у то­чек решетки. Итак, базисное состояние изображается символом | электрон в *х, у,* z>, а амплитуда того, что электрон в неко­тором состоянии |ψ> окажется в этом базисном состоянии, есть

*С (х, у,* z)=< электрон в *х, у, z* |ψ>.

Как и прежде, амплитуды *С (х, у,* z) могут меняться во вре­мени. При наших предположениях гамильтоновы уравнения обязаны выглядеть следующим образом:



Хоть это и выглядит громоздко, но вы сразу, конечно, поймете, откуда взялось каждое слагаемое.

Опять попробуем найти стационарное состояние, в котором все *С* меняются со временем одинаково. И снова решение есть экспонента

C:\Мои документы\gray.jpg

Если вы подставите это в (11.22), то увидите, что оно вполне подойдет, если только энергия *Е* будет связана с *kx, ky* и *kz* следующим образом:

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь энергия зависит от *трех* волновых чисел *kx, ky, kz,* которые, кстати, есть компоненты трехмерного вектора **k**.

И действительно, (11.23) можно переписать в векторных обо­значениях:

C:\Мои документы\gray.jpg

Амплитуда меняется как комплексная *плоская волна,* которая движется в трехмерном пространстве в направлении **k** с волно­вым числом *k*=*(k*2*x+k*2*y+ k*2*z)1/2.*

Энергия, связываемая с этими стационарными состояниями, зависит от трех компонент **k** сложным образом, подчиняясь уравнению (11.24). Характер изменения *Е* зависит от относи­тельных знаков и величин *Ах,Ау* и *Аz.* Если вся эта тройка положительна и если нас интересуют лишь маленькие **k**, то зависимость оказывается сравнительно простой.

Разлагая косинус, как и раньше [см. (11.16)], мы теперь придем к

C:\Мои документы\gray.jpg

В простой кубической решетке с расстоянием *а* между узлами следует ожидать, что и *Ах,* и *Аy,* и *Аг* будут все равны друг другу (скажем, равны *А),* так что получилось бы

C:\Мои документы\gray.jpg

или

C:\Мои документы\gray.jpg

А это как раз совпадает с (11.16). Повторяя те же рассуждения, что и тогда, мы пришли бы к заключению, что электронный пакет в *трех* измерениях (составленный путем суперпозиции множества состояний с почти одинаковыми энергиями) также движется на манер классической частицы, обладающей некото­рой эффективной массой.

В кристалле не с кубической, а с более низкой симметрией (или даже в кубическом кристалле, но таком, в котором состоя­ние электрона около атома несимметрично) три коэффициента *Ах, Аy* и *Az* различны. Тогда «эффективная масса» элект­рона, сосредоточенного в узкой области, *зависит от направле­ния его движения.* Может, например, оказаться, что у него раз­ная инерция при движении в направлении *х* и при движении в направлении *у.* (Детали такого положения вещей иногда описываются с помощью «тензора эффективной массы».)

**§ 5. Другие состояния в решетке**

Согласно (11.24), состояния электрона, о которых мы гово­рили, могут обладать энергиями только в некоторой энергети­ческой «полосе», простирающейся от наименьшей энергии

*Е0-*2*(Ая+Ау+Аг)*

до наибольшей

*E*0*+*2*(Ax+Ay+Az).*

Другие энергии тоже возможны, но они принадлежат к другому классу состояний электрона. Для тех состояний, о которых говорилось раньше, мы выбирали такие базисные состояния, когда электрон в атоме кристалла находился в некотором определенном состоянии, скажем в состоянии наинизшей энергии.

Если у вас есть атом в пустом пространстве и вы добавляете к нему электрон, чтобы получился ион, то этот ион можно обра­зовать многими способами. Электрон может расположиться так, чтобы образовать состояние наинизшей энергии, или так, чтобы образовать то или иное из многих возможных «возбуж­денных состояний» иона, каждое с определенной энергией, ко­торая превосходит наинизшее значение. То же может случиться и в кристалле. Допустим, что энергия *Е*0*,* которой мы пользо­вались выше, соответствует базисным состояниям, представляю­щим собой ионы с наинизшей возможной энергией. Но можно также вообразить новую совокупность базисных состояний, в которых электрон по-иному располагается возле *n*-го атома: он образует одно из возбужденных состояний иона, так что энергия *Е*0теперь уже становится чуть повыше. Как и раньше, имеется некоторая амплитуда *А* (отличная от прежней) того, что электрон перепрыгнет из своего возбужденного состояния близ одного атома в такое же возбужденное состояние подле сосед­него атома. И весь анализ проходит, как раньше; мы обнаружим полосу возможных энергий, сосредоточенных вокруг некото­рой высшей энергии. Вообще говоря, таких полос может быть много и каждая будет отвечать своему уровню возбуждения.

Мыслимы и другие возможности. Может существовать неко­торая амплитуда того, что электрон перепрыгнет из возбужден­ного положения возле одного атома в невозбужденное положе­ние близ следующего атома. (Это называется взаимодействием между полосами.) Математическая теория становится все слож­нее и сложнее по мере того, как вы принимаете во внимание все больше и больше полос и добавляете все больше и больше коэф­фициентов просачивания между различными состояниями. Ни­каких новых идей не нужно; но уравнения, как мы видели из нашего простого примера, сильно разрастаются.

Следует еще заметить, что о различных коэффициентах, та­ких, как появляющаяся в теории амплитуда *А,* сказать можно лишь немногое. Их, как правило, очень трудно подсчитать, и в практических случаях об этих параметрах теоретически бывает очень мало известно; в тех или иных реальных случаях приходится их значения брать из опыта.

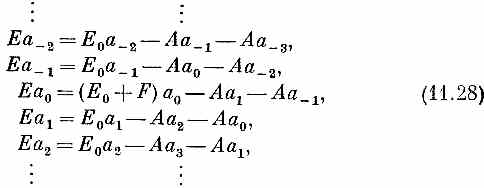
Бывают и другие случаи, в которых вся физика и вся мате­матика почти в точности совпадают с тем, что мы обнаружили для электрона, движущегося по кристаллу, но в которых дви­жущийся «объект» совсем не тот. Представим, например, что нашим исходным кристаллом (или, лучше сказать, линейной решеткой) была цепочка нейтральных атомов, у каждого из которых связь с внешним электроном очень слаба. Теперь во­образим, что мы убрали один электрон. У какого из атомов? Пусть *Сn* есть амплитуда того, что электрон *исчез* у атома, стоящего в точке *хn.* Вообще говоря, имеется какая-то ампли­туда *А* того, что электрон от соседнего атома, скажем от *(n-*1)-го, перепрыгнет к *n*-му, оставив свой *(n-*1)-й атом без электрона. Это все равно, что сказать, что у «нехватки электро­на» имеется амплитуда *А* того, что она переберется от *n*-го атома к (*n*-1)-му. Легко видеть, что уравнения окажутся такими же, как и раньше, но, конечно, сами *А* не обязательно останутся прежними. Мы опять придем к тем же формулам для уровней энергии, для «волн» вероятности, которые бегут по кристаллу с групповой скоростью (11.18), для эффективной массы и т. д. Только теперь эти волны описывают поведение *недостающего* электрона или, как его называют, «дырки». Можно убедиться, что заряд этой частицы будет казаться положительным. В сле­дующей главе мы немного подробнее расскажем об этих дырках. Другой пример. Представим себе цепочку *нейтральных* атомов, один из которых был приведен в возбужденное состояние, т. е. с более высокой, чем у нормального основного состояния, энергией. Пусть *Сn —* амплитуда того, что *n*-й атом возбужден. Он может взаимодействовать с соседним атомом, передавая ему свой избыток энергии и возвращаясь в основное состояние. Обозначим амплитуду этого процесса *iA/h.* Вы видите, что опять повторяется та же математика. Но теперь то, что движется, называется *экситоном.* Оно ведет себя как нейтральная «части­ца», которая движется через кристалл и несет с собой энергию возбуждения. Существование такого движения можно предпо­лагать в некоторых биологических процессах, таких, как зре­ние или фотосинтез. Была высказана догадка, что поглощение света в сетчатке создает «экситон», который движется через некоторую периодическую структуру [такую, как слои палочек, описанные в гл. 36 (вып. 3); см. там фиг. 36.5] и аккумулирует­ся на некоторых специальных станциях, где эта энергия ис­пользуется для возбуждения химической реакции.

**§ 6. Рассеяние па нерегулярностях решетки**

Теперь мы хотим рассмотреть одиночный электрон в не­идеальном кристалле. Наш первоначальный анализ привел к выводу, что у идеальных кристаллов и проводимость идеальна, что электроны могут скользить по кристаллу, как по вакууму, без трения. Одной из самых важных причин, способных прекратить вечное движение электрона, является несовершенство кристалла, какая-то нерегулярность в нем. Допустим, что где-то в кристалле не хватает одного атома, или предположим, что кто-то поставил на место, предназначенное для какого-то атома, совсем не тот атом, какой положено, так что в этом месте все совсем не так, как в прочих местах. Скажем, другая энергия *Е*0или другая амплитуда *А.* Как тогда можно будет описать все происходящее?

Для определенности вернемся к одномерному случаю и до­пустим, что атом номер «нуль» — это атом «загрязнения», «примеси» и у него совсем не такая энергия *Е*0*,* как у других атомов. Обозначим эту энергию *Е*0+*F.* Что же происходит? Для электрона, который достиг атома «нуль», есть какая-то вероятность того, что он рассеется назад. Если волновой пакет, мчась по кристаллу, достигает места, где все немного иначе, то часть его будет продолжать лететь вперед, а другая отскочит назад. Анализировать такой случай, пользуясь вол­новым пакетом, очень трудно, потому что все меняется во вре­мени. С решениями в виде установившихся состояний работать много легче. Мы обратимся поэтому к стационарным состоя­ниям; мы увидим, что их можно составить из непрерывных волн, состоящих из двух частей — пробегающей и отраженной. В случае трех измерений мы бы назвали отраженную часть рас­сеянной волной, потому что она разбегалась бы во все стороны.

Исходим из системы уравнений, похожей на (11.6), за одним исключением: уравнение при *n=*0 не похоже на остальные. Пятерка уравнений при *n*=-2,-1, 0, +1 и +2 выглядит так:



Конечно, будут и другие уравнения при |*n*|>2. Они будут выгля­деть так же, как (11.6).

Нам полагалось бы на самом деле для общности писать разные *А,* в зависимости от того, прыгает ли электрон *к* атому «нуль» или же *от* атома «нуль», но главные черты того, что происходит, вы увидите уже из упрощенного примера, когда все *А* равны.

Уравнение (11.10) по-прежнему будет служить решением Для всех уравнений, кроме уравнения для атома «нуль» (для него оно не годится). Нам нужно другое решение; соорудим его так. Уравнение (11.10) представляет волну, бегущую в поло­жительном направлении *х.* Волна, бегущая в отрицательном направлении *х,* тоже подошла бы в качестве решения. Мы бы написали



Самое общее решение уравнения (11.6) представляло бы собой сочетание волны вперед и волны назад:

C:\Мои документы\gray.jpg

Это решение представляет комплексную волну с амплитудой *а,* бегущую в направлении *+х,* и волну с амплитудой β, бегущую в направлении -*х.*

Теперь бросим взгляд на систему уравнений нашей новой задачи: на (11.28) плюс такие же уравнения для остальных атомов. Уравнения, куда входят *аn с n≤-*1, решаются форму­лой (11.29) при условии, что *k* оказывается связанным с *Е* и постоянной решетки *b* соотношением

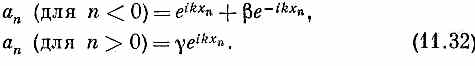
*E=E0-2Acoskb.* (11.30)

Физический смысл этого таков: «падающая» волна с амплитудой α приближается к атому «нуль» (или «рассеивателю») слева, а «рассеянная» или «отраженная» волна с амплитудой β бежит обратно, т. е. налево. Не теряя общности, можно положить амплитуду α падающей волны равной единице. Тогда ампли­туда β будет, вообще говоря, комплексным числом.

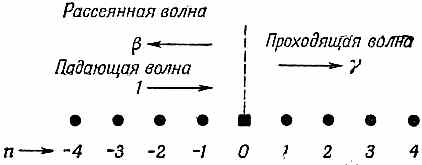
То же самое можно сказать и о решениях *аn* при *n≥*1*.* Коэф­фициенты могут стать иными, так что следовало бы писать

C:\Мои документы\gray.jpg

Здесь γ — амплитуда волны, бегущей направо, а δ — амплитуда волны, приходящей справа. Мы хотим рассмотреть такой *физический* случай, когда вначале волна бежит только слева, и за рассеивателем (или атомом загрязнения) имеется только «прошедшая» волна. Будем поэтому искать решение, в котором δ=0. Стало быть, мы попытаемся удовлетворить всем уравне­ниям для *аn,* кроме средней тройки в (11.28), с помощью сле­дующих пробных решений:

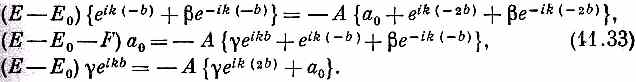


Положение, о котором идет речь, иллюстрируется фиг. 11.6.



*Фиг. 11.6. Волны в одномерной решетке а одним «примесным» атомом в n=*0.

Используя формулы (11.32) для *а*-1и *а*+1, можно из сред­ней тройки уравнений (11.28) найти *а*0 и два коэффициента β и γ. Таким образом, мы найдем полное решение. Надо решить три уравнения (полагая *xn=nb)*:



Вспомните, что (11.30) выражает *E* через *k*. Подставьте это значение *Е* в уравнения и учтите, что

C:\Мои документы\gray.jpg

тогда из первого уравнения получится

a0=1+β, (11.34)

а из третьего

a0=γ, (11.35)

что согласуется друг с другом только тогда, когда

γ=1+β. (11.36)

Это уравнение сообщает нам, что прошедшая волна (γ) — это просто исходная падающая волна (1) плюс добавочная волна (β), равная отраженной. Это не всегда так, но при рассеянии на одном только атоме оказывается, что это так. Если бы у вас была целая группа атомов примеси, то величина, добавляемая к волне, бегущей вперед, не обязательно вышла бы такой же, как у отраженной волны.

Амплитуду β отраженной волны мы можем получить из среднего из уравнений (11.33); окажется, что

C:\Мои документы\gray.jpg

Мы получили полное решение для решетки с одним необычным

атомом.

Вас могло удивить, отчего это проходящая волна оказа­лась «выше», чем падавшая, если судить по уравнению (11.34). Но вспомните, что β и γ *—* числа комплексные и что число частиц в волне (или, лучше сказать, вероятность обнаружить частицу) пропорционально квадрату модуля амплитуды. В дей­ствительности «сохранение числа электронов» будет выполнено лишь при условии

|β|2+|γ|2=1. (11.38)

Попробуйте показать, что в нашем решении так оно и есть.

**§ 7. Захват нерегулярностями решетки**

Бывает и другой интересный случай. Он может возникнуть, когда *F* число отрицательное. Если энергия электрона в атоме примеси (при *n=*0) ниже, чем где-либо в другом месте, то электрон может оказаться захваченным этим атомом. Иначе говоря, если *Е*0+*F* ниже самого низа полосы (меньше, чем *Е*0*-*2*А),* тогда электрон может оказаться «пойманным» в со­стояние с *Е<Е0-*2*А.* Из всего того, что мы делали до сих пор, такое решение не могло получиться. Но это решение можно получить, если в пробном решении (11.15) разрешить *k* прини­мать мнимые значения. Положим *k = ix.* Для *n*<0 и для *n*>0 у нас опять будут разные решения. Для *n*>0 допустимое решение могло бы иметь вид

C:\Мои документы\gray.jpg

В экспоненте мы выбрали плюс; иначе амплитуда при больших отрицательных *n* стала бы бесконечно большой. Точно так же допустимое решение для *n*>0 имело бы вид

C:\Мои документы\gray.jpg

Если подставить эти пробные решения в (11.28), то они удов­летворят всем уравнениям, кроме средней тройки, при условии, что

C:\Мои документы\gray.jpg

А раз сумма этих двух экспонент всегда больше 2, то эта энергия оказывается за пределами (ниже) обычной полосы. Это-то мы и искали. Оставшейся тройке уравнений (11.28) удастся удовлетворить, если взять *с* = с' и если *к* выбрать так, чтобы

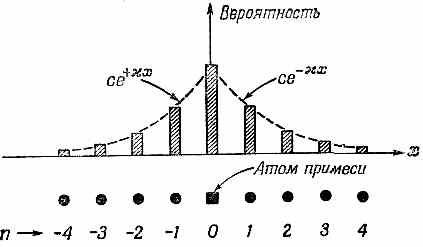
C:\Мои документы\gray.jpg

Сопоставив это уравнение с (11.41), найдем энергию захвачен­ного электрона

C:\Мои документы\gray.jpg

Захваченный электрон обладает одной-единственной энергией (а не целой полосой); она расположена несколько ниже полосы проводимости.

Заметьте, что амплитуды (11.39) и (11.40) *не* утверждают, что пойманный электрон сидит прямо в атоме примеси. Вероят­ность обнаружить его у одного из соседних атомов дается квад­ратом этих амплитуд. Изменение ее показано столбиками на фиг. 11.7 (при каком-то наборе параметров).



*Фиг. 11.7. Относительные вероятности обнаружить захваченный электрон в атом­ных узлах поблизости от примесного ато­ма — ловушки.*

С наибольшей вероятностью электрон можно встретить близ атома примеси. Для соседних атомов вероятность спадает экспоненциально по мере удаления от атома примеси. Это новый пример «проникно­вения через барьер». С точки зрения классической физики элек­трону не хватило бы энергии, чтобы удалиться от энергетиче­ской «дырки» близ центра захвата. Но квантовомеханически он может куда-то недалеко просочиться.

**§ 8. Амплитуды** **рассеяния и связанные состояния**

Наш последний пример может быть использован, чтобы проиллюстрировать одну вещь, которая в наши дни очень полезна для физики частиц высокой энергии. Речь идет о связи между амплитудами рассеяния и связанными состояниями. Положим, мы открыли (при помощи опытов и теоретического анализа), как пионы рассеиваются на протонах. Затем откры­вается новая частица и кому-то хочется узнать, не является ли она просто комбинацией из пиона и протона, объединенных в одно связанное состояние (по аналогии с тем, как электрон, будучи связан с протоном, образует атом водорода)? Под связанным состоянием мы подразумеваем комбинацию, энергия которой ниже, чем у пары свободных частиц.

Существует общая теория, согласно которой, если ампли­туду рассеяния проэкстраполировать (или, на математическом языке, «аналитически продолжить») на энергии вне разрешен­ной зоны, то при такой энергии, при которой амплитуда стано­вится бесконечной, возникнет связанное состояние. Физическая причина этого такова. Связанное состояние — это когда имеют­ся только волны, стоящие близ некоторой точки; это состояние не порождается никакой начальной волной, оно просто сущест­вует само по себе. Относительная пропорция между так называе­мыми «рассеянными», или созданными, волнами и волнами, «посылаемыми внутрь», равна бесконечности. Эту идею мы мо­жем проверить на нашем примере. Выразим нашу рассеянную амплитуду (11.37) прямо через энергию *Е* рассеявшейся частицы (а не через *k).* Уравнение (11.30) можно переписать в виде

C:\Мои документы\gray.jpg

поэтому рассеянная амплитуда равна

C:\Мои документы\gray.jpg

Из вывода формулы следует, что применять ее можно только для реальных состояний — для тех, энергия которых попадает в энергетическую полосу, *Е=Е*0*+2А.* Но представьте, что мы об этом забыли и расширили нашу формулу на «нефизические» области энергии, где | *Е-Е0*|>2*A*. Для этих нефизических областей [можно написать](#прим2)

C:\Мои документы\gray.jpg

Тогда «амплитуда рассеяния» (что бы это выражение ни зна­чило) равна

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь задаем вопрос: существует ли такая энергия *Е,* при которой β становится бесконечным (т. е. при которой выраже­ние для β имеет «полюс»)? Да, существует, если только *F* отри­цательно; тогда знаменатель (11.45) обратится в нуль при

C:\Мои документы\gray.jpg

т. е. при

C:\Мои документы\gray.jpg

При знаке минус получается как раз то, что мы получили в (11.43) для энергии захваченного электрона.

А как быть со знаком плюс? Он приводит к энергии *выше* разрешенной полосы энергий. И действительно, существует другое связанное состояние, которое мы пропустили, решая (11.28). Найти энергию и амплитуды *аn* для этого связанного состояния вам предоставляется самим.

Одним из ключей (причем самых надежных) к разгадке экспе­риментальных наблюдений над новыми странными частицами служит это соотношение между законом рассеяния и связан­ными состояниями.

***\* Знак корня, который здесь следовало поставить, это технический вопрос, связанный с допустимыми знаками к в (11.39) и (11.40). Мы не будем здесь вдаваться в подробности.***

***\* Только не старайтесь сделать пакет чересчур узким.***

***Г л а в a 12*** [**ПОЛУПР****ОВОДНИКИ**](#прим1)

[**§ 1. Электроны и** **дырки в полупроводниках**](#a1)

[**§ 2. Примесные пол****упроводники**](#a2)

[**§ 3. Эффект** **Холла**](#a3)

[**§ 4. Переходы** **между полупроводни­ками**](#a4)

[**§ 5. Выпрямление на п****олупровод­никовом переходе**](#a5)

[**§ 6. Тра****нзистор**](#a6)

**§ 1. Электроны и дырки в полупроводниках**

Одним из самых замечательных и волную­щих открытий последних лет явилось приме­нение физики твердого тела к технической разработке ряда электрических устройств, таких, как транзисторы. Изучение полупро­водников привело к открытию их полезных свойств и ко множеству практических приме­нений. В этой области все меняется так быстро, что рассказанное вам сегодня может через год оказаться уже неверным или, во всяком случае, неполным. И совершенно ясно, что, подробнее изучив такие вещества, мы со временем сумеем осуществить куда более удивительные вещи. Материал этой главы вам не понадобится для понимания следующих глав, но вам, вероятно, будет интересно убедиться, что по крайней мере кое-что из того, что вы изучили, как-то все же связано с практическим делом.

Полупроводников известно немало, но мы ограничимся теми, которые больше всего при­меняются сегодня в технике. К тому же они и изучены лучше других, так что разобравшись в них, мы до какой-то степени поймем и многие другие. Наиболее широко применяемые в на­стоящее время полупроводниковые вещества это кремний и германий. Эти элементы кристал­лизуются в решетке алмазного типа — в такой кубической структуре, в которой атомы обла­дают четверной (тетраэдральной) связью со своими ближайшими соседями. При очень низ­ких температурах (вблизи абсолютного нуля) они являются изоляторами, хотя при комнатной температуре они немного проводят электричество. Это не металлы; их называют *полупроводниками.*

Если каким-то образом в кристалл кремния или германия при низкой температуре мы введем добавочный электрон, то возникнет то, что описано в предыдущей главе. Такой электрон начнет блуждать по кристаллу, перепрыгивая с места, где стоит один атом, на место, где стоит другой. Мы рассмотрели только поведение атома в прямоугольной решетке, а для реаль­ной решетки кремния или германия уравнения были бы дру­гими. Но все существенное может стать ясным уже из резуль­татов для прямоугольной решетки.

Как мы видели в гл. И, у этих электронов энергии могут находиться только в определенной полосе значений, называемой *зоной проводимости.* В этой зоне энергия связана с волновым числом **k** амплитуды вероятности *С* [см. (11.24)1 формулой

C:\Мои документы\gray.jpg

Разные *A —* это амплитуды прыжков в направлениях *х, у* и z, а *а, b, с —* это постоянные решетки (интервалы между узлами) в этих направлениях.

Для энергий возле дна зоны формулу (12.1) можно прибли­зительно записать так:

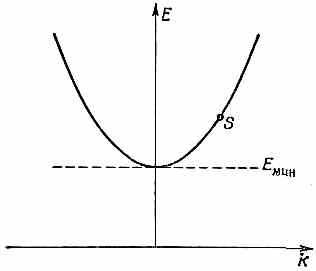
C:\Мои документы\gray.jpg

(см. гл. 11, § 4).

Если нас интересует движение электрона в некотором опре­деленном направлении, так что отношение компонент **k** все время одно и то же, то энергия есть квадратичная функция волнового числа и, значит, импульса электрона. Можно напи­сать

C:\Мои документы\gray.jpg

где α — некоторая постоянная, и начертить график зависимости *Е от k* (фиг. 12.1).



*Фиг. 12.1. Энергетическая диаг­рамма для электрона в кристалле изолятора.*

Такой график мы будем называть «энергетиче­ской диаграммой». Электрон в определенном состоянии энергии и импульса можно на таком графике изобразить точкой (*S* на рисунке).

Мы уже упоминали в гл. 11, что такое *же* положение вещей возникнет, если мы *уберем* электрон из нейтрального изолятора. Тогда на это место сможет перепрыгнуть электрон от соседнего атома. Он заполнит «дырку», а сам оставит на том месте, где стоял, новую «дырку». Такое поведение мы можем описать, задав амплитуду того, что *дырка* окажется возле данного опре­деленного атома, и говоря, что *дырка* может прыгать от атома к атому. (Причем ясно, что амплитуда *А* того, что дырка пере­прыгивает от атома *а* к атому *b*, в точности равна амплитуде того, что электрон от атома *b* прыгает в дырку от атома а.)

Математика для *дырки* такая же, как для добавочного элект­рона, и мы опять обнаруживаем, что энергия дырки связана с ее волновым числом уравнением, в точности совпадающим с (12.1) и (12.2), но, конечно, с другими численными значениями амплитуд *Ах, Ay* и *Аz.* У дырки тоже есть энергия, связанная с волновым числом ее амплитуд вероятности. Энергия ее лежит в некоторой ограниченной зоне и близ дна зоны квадратично меняется с ростом волнового числа (или импульса) так же, как на фиг. 12.1. Повторяя наши рассуждения гл. 11, § 3, мы обна­ружим, что *дырка тоже ведет себя как классическая частица* с какой-то определенной эффективной массой, с той только раз­ницей, что в некубических кристаллах масса зависит от направ­ления движения. Итак, дырка напоминает *частицу с положи­тельным зарядом,* движущуюся сквозь кристалл. Заряд ча­стицы-дырки положителен, потому что она сосредоточена в том месте, где нет электрона; и когда она движется в какую-то сто­рону, то на самом деле это в обратную сторону движутся электроны.

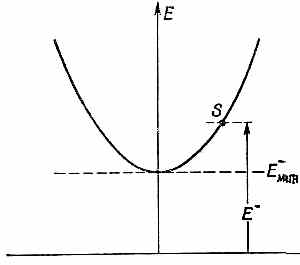
Если в нейтральный кристалл поместить несколько электро­нов, то их движение будет очень похоже на движение атомов в газе, находящемся под низким давлением. Если их не слишком много, их взаимодействием можно будет пренебречь. Если затем приложить к кристаллу электрическое поле, то электроны нач­нут двигаться и потечет электрический ток. В принципе они должны очутиться на краю кристалла и, если там имеется ме­таллический электрод, перейти на него, оставив кристалл нейт­ральным.

Точно так же в кристалл можно было бы ввести множество дырок. Они бы начали повсюду бродить как попало. Если при­ложить электрическое поле, то они потекут к отрицательному электроду и затем их можно было бы «снять» с него, что и про­исходит, когда их нейтрализуют электроны с металлического электрода.

Электроны и дырки могут оказаться в кристалле одновре­менно. Если их опять не очень много, то странствовать они будут независимо. В электрическом поле все они будут давать свой вклад в общий ток. По очевидной причине электроны назы­вают *отрицательными носителями,* а дырки — *положитель­ными носителями.*

До сих пор мы считали, что электроны внесены в кристалл извне или (для образования дырки) удалены из него. Но можно также «создать» пару электрон—дырка, удалив из нейтрального атома связанный электрон и поместив его в том же кристалле на некотором расстоянии. Тогда у нас получатся свободный электрон и свободная дырка, и движение их будет таким, как мы описали.

Энергия, необходимая для того, чтобы поместить электрон в состояние *S* (мы говорим: чтобы «создать» состояние *S),*— это энергия *Е-,* показанная на фиг. 12.2.

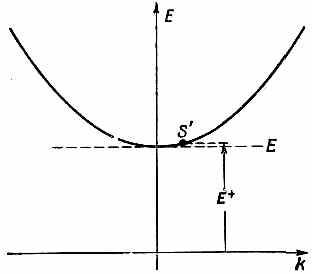


*Фиг. 12.2, Энергия Е, требуемая для «рождения» свободного*

*электрона.*

Это некоторая энергия,

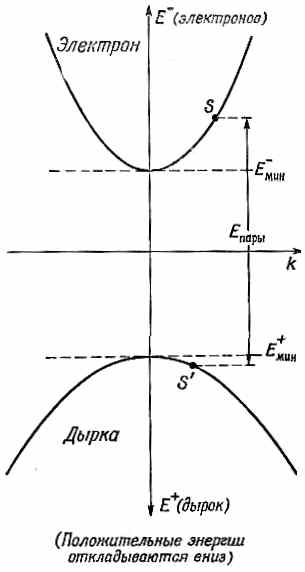
превышающая *Е-*мин*.* Энергия, необходимая для того, чтобы «создать» дырку в каком-то состоянии *S*',— это энергия *Е+* (фиг. 12.3), которая на какую-то долю выше, чем *Е (=Е+*мин*).*



*Фиг. 12.3. Энергия Е+ , тре­буемая для «рождения» дырки в состоянии S'.*

А чтобы создать пару в со­стояниях *S* и *S',* потребуется просто энергия *Е-*+*Е+.*

Образование пар — это, как мы увидим позже, очень частый процесс, и многие люди предпочитают поме­щать фиг. 12.2 и 12.3 на один чертеж, причем энергию *дырок* откладывают *вниз,* хотя, конечно, эта энергия *положительна.* На фиг. 12.4 мы объединили эти два гра­фика.

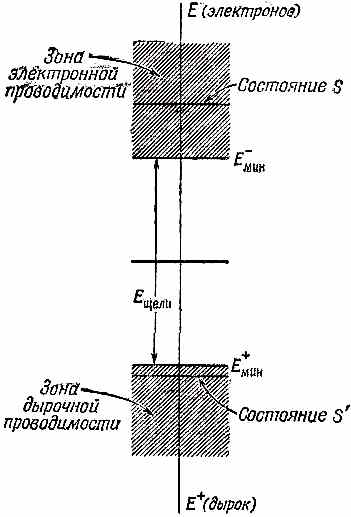


*Фиг. 12.4. Энергетические диаграммы для электрона и дырки.*

Преимущества такого графика в том, что энергия *E*пары*=Е-+Е+ ,* требуемая для образования пары (электрона в *S* и дырки в *S’* ), дается попросту расстоянием по вертикали между *S* и *S',* как показано на фиг. 12.4. Наименьшая энергия, требуемая для образования пары, называется энерге­тической шириной, или шириной щели, и равняется

*е-*мин*+e+*мин.

Иногда вам может встретиться и диаграмма попроще. Ее рисуют те, кому не интересна переменная *k,* называя ее диа­граммой энергетических уровней. Эта диаграмма (она показана на фиг. 12.5) просто указывает допустимые энергии у электро­нов [и дырок](#прим2).



*Фиг. 12.5. Диаграмма энер­гетических уровней для электронов и дырок.*

Как создается пара электрон—дырка? Есть несколько спо­собов. Например, световые фотоны (или рентгеновские лучи)

могут поглотиться и обра­зовать пару, если только энергия фотона больше энергетической ширины. Быстрота образования пар пропорциональна интен­сивности света. Если при­жать к торцам кристалла два электрода и прило­жить «смещающее» напря­жение, то электроны и дырки притянутся к элек­тродам. Ток в цепи будет пропорционален силе све­та. Этот механизм ответствен за явление фотопроводимости и за работу фотоэлементов. Пары электрон — дырка могут образоваться также части­цами высоких энергий. Когда быстро движущаяся заряженная частица (например, протон или пион с энергией в десятки и сотни *Мэв)* пролетает сквозь кристалл, ее электрическое поле может вырвать электроны из их связанных состояний, образуя пары электрон — дырка. Подобные явления сотнями и тыся­чами происходят на каждом миллиметре следа. После того как частица пройдет, можно собрать носители и тем самым вызвать электрический импульс. Перед вами механизм того, что разы­грывается в полупроводниковых счетчиках, в последнее время используемых в опытах по ядерной физике. Для таких счетчи­ков полупроводники не нужны, их можно изготовлять и из кристаллических изоляторов. Так и было на самом деле: первый из таких счетчиков был изготовлен из алмаза, который при ком­натных температурах является изолятором. Но нужны очень чистые кристаллы, если мы хотим, чтобы электроны и дырки

I могли добираться до электродов, не боясь захвата. Потому и используются кремний и германий, что образцы этих полупро­водников разумных размеров (порядка сантиметра) можно по­лучать большой чистоты.

До сих пор мы касались только свойств полупроводниковых кристаллов при температурах около абсолютного нуля. При любой ненулевой температуре имеется еще другой механизм создания пар электрон — дырка. Энергией пару может снаб­дить тепловая энергия кристалла. Тепловые колебания кристал­ла могут передавать паре свою энергию, вызывая «самопроиз­вольное» рождение пар.

Вероятность (в единицу времени) того, что энергия, дости­гающая величины энергетической щели *E*щели, сосредоточится в месте расположения одного из атомов, пропорциональна ехр(-*Ещеяи/kТ),* где *Т—*температура, а k*—* постоянная Больц­мана [см. гл. 40 (вып. 4)]. Вблизи абсолютного нуля вероятность эта мало заметна, но по мере роста температуры вероятность образования таких пар возрастает. Образование пар при любой конечной температуре должно продолжаться без конца, давая все время с постоянной скоростью все новые и новые положи­тельные и отрицательные носители. Конечно, на самом деле этого не будет, потому что через мгновение электроны случайно снова повстречаются с дырками, электрон скатится в дырку, а освобожденная энергия перейдет к решетке. Мы скажем, что электрон с дыркой «аннигилировали». Имеется определенная вероятность того, что дырка встретится с электроном и оба они друг друга уничтожат.

Если количество электронов в единице объема есть *N*n *(n* означает негативных, или отрицательных, носителей), а плот­ность положительных (позитивных) носителей *Np,* то вероят­ность того, что за единицу времени электрон с дыркой встре­тятся и проаннигилируют, пропорциональна произведению *NnNp.* При равновесии эта скорость должна равняться ско­рости, с какой образуются пары. Стало быть, при равновесии произведение *NnNp* должно равняться произведению некото­рой постоянной на больцмановский множитель

C:\Мои документы\gray.jpg

Говоря о постоянной, мы имеем в виду ее примерное постоянство. Более полная теория, учитывающая различные детали того, как электроны с дырками «находят» друг друга, свидетельствует, что «постоянная» слегка зависит и от температуры; но главная зависимость от температуры лежит все же в экспоненте.

Возьмем, например, чистое вещество, первоначально бывшее нейтральным. При конечной температуре можно ожидать, что число положительных и отрицательных носителей будет одно и то же, *Nn* = *Nр.* Значит, каждое из этих чисел должно с температурой меняться какC:\Мои документы\gray.jpg. Изменение мно­гих свойств полупроводника (например, его проводимости) определяется главным образом экспоненциальным множителем, потому что все другие факторы намного слабее зависят от тем­пературы. Ширина щели для германия примерно равна 0,72 *эв,* а для кремния 1,1 *эв.*

При комнатной температуре k*Т* составляет около 1/40 *эв.* При таких температурах уже есть достаточно дырок и электро­нов чтобы обеспечить заметную проводимость, тогда как, ска­жем, при 30°К (одной десятой комнатной температуры) прово­димость незаметна. Ширина щели у алмаза равна 6—7 *эв,* по­этому при комнатной температуре алмаз — хороший изолятор.

**§ 2. Примесные полупроводники**

До сих пор мы говорили только о двух путях введения доба­вочных электронов в кристаллическую решетку, которая во всем остальном совершенно идеальна. Один путь — это впрыс­нуть электрон от внешнего источника, а другой — выбить связанный электрон из нейтрального атома, сотворив одновре­менно и электрон и дырку. Но можно внедрить электроны в зону проводимости кристалла совершенно иным способом. Представим себе кристалл германия, в котором один из атомов германия заменен атомом мышьяка. У атомов германия валент­ность равна 4, и кристаллическая структура контролируется четырьмя валентными электронами. А у мышьяка валентность равна 5. И вот оказывается, что отдельный атом мышьяка в состоянии засесть в решетке германия (потому что габариты у него как раз такие, как надо), но при этом он будет вынужден действовать как четырехвалентный атом, тратя четыре валент­ных электрона из своего запаса на создание кристаллических связей и отбрасывая пятый. Этот лишний электрон привязан к нему очень слабо — энергия связи менее 1/10 *эв.* При комнат­ной температуре электрон с легкостью раздобудет такую не­большую энергию у тепловой энергии кристалла и отправится на свой страх и риск блуждать по решетке на правах свобод­ного электрона. Примесный атом наподобие мышьяка назы­вается *донорным узлом,* потому что он может снабдить кристалл отрицательным носителем. Если кристалл германия выращи­вается из расплава, куда было добавлено небольшое количество мышьяка, то мышьяковые донорские пункты распределятся по всему кристаллу и у кристалла появится определенная плот­ность внедренных отрицательных носителей.

Могло бы показаться, что малейшее электрическое поле, приложенное к кристаллу, смело бы эти носители прочь. Но этого не случится, ведь каждый атом мышьяка в теле кристалла заряжен положительно. Чтобы весь кристалл оставался нейт­ральным, средняя плотность отрицательных носителей — элект­ронов — должна быть равна плотности донорных узлов. Если вы приложите к граням этого кристалла два электрода и подключите их к батарейке, пойдет ток; но если с одного конца уносятся электроны-носители, то на другой конец должны по­ступать свежие электроны проводимости, так что средняя плотность электронов проводимости остается все время пример­но равной плотности донорных узлов.

Поскольку донорные узлы заряжены положительно, у них должно наблюдаться стремление перехватывать некоторые из электронов проводимости, когда последние блуждают по кри­сталлу. Поэтому донорный узел должен действовать как раз как та ловушка, о которой мы говорили в предыдущем пара­графе. Но если энергия захвата достаточно мала (как у мышья­ка, например), то общее число захваченных в какой-то момент носителей должно составлять лишь малую часть их общего числа. Для полного понимания поведения полупроводников этот захват, конечно, следует иметь в виду. Однако мы в даль­нейшем будем считать, что энергия захвата настолько низка, а температура так высока, что на донорных узлах нет элект­ронов. Конечно, это всего-навсего приближение.

Можно также внедрить в кристалл германия атом примеси с валентностью 3, скажем атом алюминия. Этот атом пытается выдать себя за объект с валентностью 4, воруя добавочный элект­рон у соседей. Он может украсть электрон у одного из соседних атомов германия и оказаться в конце концов отрицательно заряженным атомом с эффективной валентностью 4. Конечно, когда он стащит у атома германия электрон, там остается дырка; и эта дырка начинает блуждать по кристаллу на правах положительного носителя. Атом примеси, который способен таким путем образовать дырку, называется *акцептором* от корня «акцепт» — принимать. Если кристалл германия или кристалл кремния выращен из расплава, в который была добав­лена небольшая присадка алюминия, то в кристалле окажется определенная плотность дырок, которые действуют как поло­жительные носители.

Когда к полупроводнику добавлена донорная или акцептор­ная примесь, мы говорим о «примесном» полупроводнике.

Когда кристалл германия с некоторым количеством внедрен­ной донорной примеси находится при комнатной температуре, то электроны проводимости поставляются как донорными узлами, так и путем рождения электронно-дырочных пар за счет тепловой энергии. Естественно, электроны от обоих источников вполне эквивалентны друг другу, и в игру статистических про­цессов, ведущих к равновесию, входит их полное число *Nn.* Если температура не слишком низкая, то число отрицательных носи­телей, поставляемых атомами донорной примеси, примерно равно количеству имеющихся атомов примеси. При равновесии уравнение (12.4) еще обязано соблюдаться; произведение *NnNp* при данной температуре есть вполне определенное число.

Это означает, что добавление донорной примеси, которое увели­чивает число *N*n, вызывает такое уменьшение количества *Np* положительных носителей, что *NnNp* не изменяется. Если кон­центрация примеси достаточно высока, то число *Nn* отрицатель­ных носителей определяется количеством донорных узлов и почти не зависит от температуры — все изменения в экспоненте происходят за счет *Nр,* даже если оно много меньше *Nn.* В чи­стом в других отношениях кристалле с небольшой концентра­цией донорной примеси будут преобладать отрицательные носи­тели; такой материал называется полупроводником «*n*-типа».

Если в кристаллической решетке добавлена примесь акцеп­торного типа, то кое-какие из новых дырок, блуждая, начнут аннигилировать с некоторыми свободными электронами, соз­даваемыми тепловыми флуктуациями. Это будет продолжаться до тех пор, пока не выполнится уравнение (12.4). В равновес­ных условиях количество положительных носителей возрастает, а количество отрицательных убывает, поддерживая произведе­ние постоянным. Материал с избытком положительных носите­лей называется полупроводником «*p*-типа».

Если к полупроводниковому кристаллу приложить пару электродов и присоединить их к источнику разницы потенциа­лов, то внутри кристалла появится электрическое поле. Оно вынудит двигаться положительные и отрицательные носители, и потечет электрический ток. Посмотрим сперва, что прои­зойдет в материале *n*-типа, в котором имеется подавляющее большинство отрицательных носителей. В таком материале дырками можно пренебречь; они очень слабо скажутся на токе, потому что их мало. В идеальном кристалле при конечной тем­пературе (а особенно в кристалле с примесями) электроны пере­мещаются не совсем беспрепятственно. С ними беспрерывно происходят столкновения, которые сбивают их с намеченного ими пути, т. е. меняют их импульс. Эти столкновения — те самые рассеяния, о которых мы толковали в предыдущей главе и которые происходят на неровностях кристаллической решетки. В материале re-типа главной причиной рассеяния служат те самые донорные узлы, которые поставляют носителей. Раз у электронов проводимости энергия на донорных узлах немного иная, то волны вероятности обязаны на этом месте рассеиваться. Но даже в идеально чистом кристалле бывают (при ненулевой температуре) нерегулярности решетки, вызванные тепловыми колебаниями. С классической точки зрения можно говорить, что атомы не выстроены точно в правильную решетку, а в любое мгновение немного сдвинуты со своих мест по причине тепловых колебаний. Энергия *Е*0*,* связывавшаяся по теории, изложенной в гл. 11, с каждой точкой решетки, чуть-чуть меняется от одного места к другому, так что волны амплитуды вероятности не передаются идеально, а каким-то неправильным образом рассеиваются. И при очень высоких температурах или для очень чистых веществ такое рассеяние может стать очень важным, но в большинстве примесных полупроводников, применяемых в практических устройствах, рассеяние происходит только за счет атомов примеси. Мы сейчас оценим величину электриче­ской проводимости в таких веществах.

Если к полупроводнику *n*-типа приложить электрическое поле, то каждый отрицательный носитель приобретет в этом поле ускорение, набирая скорость до тех пор, пока не рассеется на одном из донорных узлов. Это означает, что носители, кото­рые обычно движутся случайным образом, имея при этом теп­ловую энергию, начнут в среднем повышать свою скорость дрей­фа вдоль линий электрического поля, вызвав ток через кристалл. Скорость дрейфа, как правило, по сравнению с типич­ными тепловыми скоростями очень мала, так что можно, прики­дывая величину тока, принять, что от столкновения к столкно­вению среднее время странствий носителя постоянно. Допустим, что эффективный электрический заряд отрицательного носителя равен *qn.* Сила, действующая на носитель в электрическом поле ξ, будет равна *q*nξ. В гл. 43, §3 (вып. 4) мы как раз подсчиты­вали среднюю скорость дрейфа в таких условиях и нашли, что она равна *Fτ/m,* где *F —* сила, действующая на заряд; τ — среднее время свободного пробега между столкновениями, а *m*— масса. Вместо нее надо поставить эффективную массу, которую мы подсчитывали в предыдущей главе, но поскольку нас интересует только грубый расчет, то предположим, что эта эффективная масса во всех направлениях одинакова. Мы ее здесь обозначим *mn.* В этом приближении средняя скорость дрейфа будет равна

C:\Мои документы\gray.jpg

Зная скорость дрейфа, можно найти ток. Плотность электриче­ского тока j равна просто числу носителей в единице объема, *Nn,* умноженному на среднюю скорость дрейфа и на заряд носи­телей. Поэтому плотность тока равна

C:\Мои документы\gray.jpg

Мы видим, что плотность тока пропорциональна электриче­скому полю; такие полупроводниковые материалы подчиняются закону Ома. Коэффициент пропорциональности между j и ξ, или проводимость σ, равен

C:\Мои документы\gray.jpg

Для материалов *n*-типа проводимость в общем не зависит от температуры. Во-первых, общее число основных носителей *Nn* определяется главным образом плотностью доноров в кристалле (пока температура не настолько низка, чтобы позволять атомам захватить чересчур много носителей), а, во-вторых, среднее время от соударения к соударению, τn, регулируется главным образом плотностью атомов примеси, а она, ясное дело, от тем­пературы не зависит.

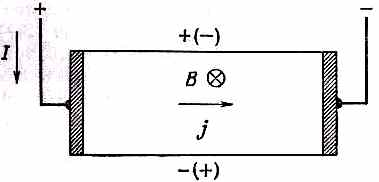
Те же рассуждения можно приложить к веществу p-типа, переменив только значения параметров, которые появляются в (12.7). Если в одно и то же время имеется сравнимое количе­ство отрицательных и положительных носителей, то вклады носителей обоего рода надо сложить. Полная проводимость определится из

C:\Мои документы\gray.jpg

Для очень чистых веществ *Nр* и *Nn* примерно равны. Они будут меньше, чем у материалов с примесями, так что и прово­димость будет меньше. Кроме того, они будут резко меняться с температурой (по законуC:\Мои документы\gray.jpg), так что проводи­мость с температурой может меняться чрезвычайно быстро.

**§ 3. Эффект Холла**

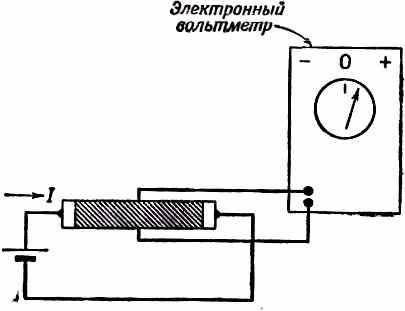
Конечно, это очень странно, что в веществе, где единствен­ными более или менее свободными объектами являются элект­роны, электрический ток вызывается дырками, которые ведут себя как положительные частицы. Мы хотим поэтому описать опыт, который довольно явно свидетельствует, что знак носи­теля электрического тока может быть положительным. Пусть имеется брусок, изготовленный из полупроводящего вещества (или из металла), и мы прикладываем к нему электрическое поле, чтобы вызвать ток в каком-то направлении, скажем в го­ризонтальном (фиг. 12.6).



*Фиг. 12.6. Эффект Холла возникает при действии магнитных сил на носи­тели.*

*Сверху и снизу указаны знаки заряда при положительных и отрицательных (в скобках) носителях.*

Пусть мы также приложили к бруску магнитное поле под прямым углом к току, скажем, чтобы оно уходило *в плоскость* чертежа. Движущиеся носители будут испытывать действие магнитной силы *q*(**vXВ**). А так как средняя скорость дрейфа направлена либо направо, либо на­лево (смотря по тому, каков знак заряда носителя), то дейст­вующая на носители средняя магнитная сила будет направлена либо вверх, либо вниз. Впрочем, нет! При выбранных нами направлениях тока и магнитного поля магнитная сила, дейст­вующая на движущийся заряд, всегда будет направлена *вверх.* Положительные заряды, движущиеся в направлении j (направо), подвергнутся действию силы, направленной вверх. А если ток переносится отрицательными зарядами, то они будут двигаться влево (при том же знаке тока проводимости) и также испыты­вают действие силы, направленной кверху. Но после установ­ления тока никакого движения носителей вверх не будет, по­тому что ток может течь только слева направо. Вначале не­сколько зарядов могут потечь вверх, образовав вдоль верхнего края полупроводника поверхностную плотность заряда и оста­вив равную по величине и обратную по знаку поверхностную плотность заряда на нижней грани кристалла. Заряды на верх­ней и нижней поверхностях будут накапливаться до тех пор, пока электрические силы, с которыми они действуют на движу­щиеся заряды, в точности погасят (в среднем) действие магнит­ной силы, и установившийся ток пойдет по горизонтали. Заряды на верхней и нижней поверхностях создадут по вертикали попе­рек кристалла разность потенциалов, которую можно измерить высокоомным вольтметром (фиг. 12.7).



*Фиг. 12.7. Измерение эффекта Холла.*

Знак разности потенциа­лов, отмечаемый вольтметром, будет зависеть от знака носите­лей зарядов, ответственных за ток.

Когда впервые ставились эти опыты, считалось, что знак разности потенциалов окажется отрицательным, как и поло­жено отрицательным электронам проводимости. Поэтому все были очень удивлены, обнаружив, что у некоторых веществ знак разности потенциалов совсем не тот. Дело выглядело так, словно носитель тока — частица с положительным знаком. Из наших рассуждений о примесных полупроводниках ясно, что полупроводник *n*-типа обязан вызывать знак разности потен­циалов, свойственный отрицательным носителям, а полупро­водник *p*-типа должен вызывать разность потенциалов противо­положного знака, поскольку ток создается положительно заря­женными дырками.

Открытие аномального знака разности потенциалов в эффек­те Холла сначала было сделано не в полупроводнике, а в ме­талле. Считалось, что уж в металлах-то проводимостью всегда занимаются электроны, и вдруг оказалось, что у бериллия знак разности потенциалов не тот. Теперь ясно, что в металлах, как и в полупроводниках, при некоторых обстоятельствах «объектами», ответственными за проводимость, оказываются дырки. Хотя в конечном счете в кристалле движутся электроны, тем не менее соотношение между импульсом и энергией и отклик на внешнее поле в точности такие, каких следовало бы ожидать, если бы электрический ток осуществлялся положительными частицами.

Поглядим, нельзя ли качественно оценить, какая разность потенциалов может быть получена при эффекте Холла. Если ток через вольтметр (см. фиг. 12.7) пренебрежимо мал, то заряды внутри полупроводника должны двигаться слева направо и вертикальная магнитная сила должна в точности гаситься вертикальным электрическим полем, которое мы обозначим ξ┴ (индекс означает «поперечный»). Чтобы это электрическое поле уничтожало магнитные силы, должно быть

C:\Мои документы\gray.jpg

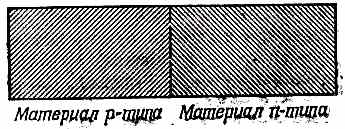
Припоминая связь между скоростью дрейфа и плотностью электрического тока, приведенную в (12.6), получаем

C:\Мои документы\gray.jpg

Разность потенциалов между верхом и низом кристалла равна, естественно, этой самой напряженности электрического поля, умноженной на высоту кристалла. Напряженность электриче­ского поля в кристалле ξ┴ пропорциональна плотности тока и напряженности магнитного поля. Множитель пропорциональ­ности *1/qN* называется коэффициентом Холла и обычно изобра­жается символом *RH.* Коэффициент Холла зависит просто от плотности носителей при условии, что носители одного знака находятся в явном большинстве. Поэтому измерение эффекта Холла дает удобный способ опытным путем определять плот­ность носителей в полупроводнике.

**§ 4. Переходы между полупроводниками**

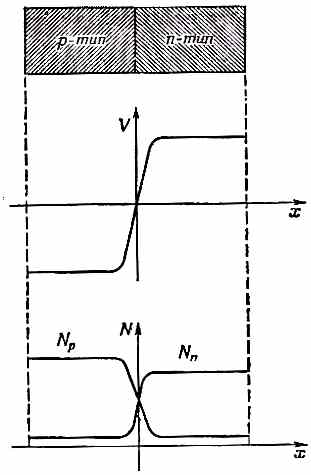
Теперь мы хотим выяснить, что получится, если взять два куска германия или кремния с неодинаковыми внутренними характеристиками, скажем с разным количеством примеси, и приложить их друг к другу, чтобы возник «переход». Начнем с того, что именуется *p—n*-переходом, когда с одной стороны границы стоит германий *p*-типа, а с другой — германий *n*-типа (фиг. 12.8).



*Фиг. 12.8. p — n-переход.*

Практически не очень удобно прикладывать друг к другу два разных куска германия и добиваться однородности контакта между ними на атомном уровне. Вместо этого переходы делают из одного кристалла, обработанного в разных концах по-разному. Один из приемов состоит в том, чтобы после того, как из расплава была выращена половинка кристалла, добавить в оставшийся расплав подходящую присадку. Другой способ — это нанести на поверхность немного примесного элемента и затем подогреть кристалл, чтобы часть атомов примеси продиффундировала в тело кристалла. У сделанных такими способами переходов нет резкой границы, хотя сами границы могут быть сделаны очень тонкими — до 10-4 *см.* Для наших рассуждений мы вообразим идеальный случай, когда эти две области кристалла с разными свойствами резко разграничены. В *n*-области *p—n*-перехода имеются свободные электроны, которые могут переходить с места на место, а также фиксиро­ванные донорные узлы, которые уравновешивают полный электрический заряд. В *p*-области имеются свободные дырки, тоже переходящие с места на место, и равное количество отри­цательных акцепторных узлов, гасящих полный заряд. Но в дей­ствительности такое описание положения вещей годится лишь до тех пор, пока между материалами не осуществлен контакт. Как только материалы соединятся, положение на границе из­менится. Теперь, достигнув границы в материале *n*-типа, элект­роны не отразятся обратно, как это было бы на свободной по­верхности, а смогут прямо перейти в материал *p*-типа. Часть электронов из материала *n*-типа поэтому будет стремиться про­скользнуть в материал *p*-типа, где электронов меньше. Но так длиться без конца не может, потому что по мере того, как в *n*-области будут теряться электроны, ее заряд начнет стано­виться все более положительным, пока не возникнет электри­ческое напряжение, которое затормозит диффузию электронов в *p*-область. Подобным же образом положительные но­сители из материала *p*-типа смогут проскальзывать через переход в материал *n*-типа, оставляя позади себя избы­ток отрицательного заряда. В условиях равновесия пол­ный ток диффузии должен будет равняться нулю. Это произойдет благодаря возни­кновению электрических полей, которые установятся таким образом, чтобы возвращать положительные носители обратно в *p*-область.

Оба описанных нами процесса диффузии продолжаются одно­временно, и оба, как видите, действуют в таком направлении, чтобы материал *n*-типа зарядить положительно, а материал *p*-типа — отрицательно. Вследствие конечной проводимости полупроводящих материалов изменение потенциала между *p*-областью и *n*-областью произойдет в сравнительно узком участке близ границы; в основной же массе каждой области потенциал будет однороден. Проведем перпендикулярно гра­нице ось *х.* Тогда электрический потенциал будет меняться с *х* так, как показано на фиг. 12.9,*б*.



*Фиг. 12,9. Электрический по­тенциал и плотности носителей в полупроводниковом переходе без смещающего напряжения.*

На фиг. 12.9,*в* показано ожи­даемое изменение плотности *Nn* *n*-носителей и плотности *Np p*-носителей. Вдали от перехода плотности носителей *Np* и *Nn* должны быть попросту равны той равновесной плотности, кото­рой положено устанавливаться в определенном бруске того же материала при той же температуре. (Фиг. 12.9 вычерчена для перехода, в котором в материале *p*-типа примеси больше, чем в материале *n*-типа.) Из-за перепада потенциала на переходе положительным носителям приходится взбираться на потен­циальный холм, чтобы попасть в *p*-область. Это означает, что в условиях равновесия в материале re-типа будет меньше поло­жительных носителей, чем в материале *p*-типа. Можно ожидать (вспомните законы статистической механики), что отношение количеств носителей *p*-типа в обеих областях будет даваться уравнением

C:\Мои документы\gray.jpg

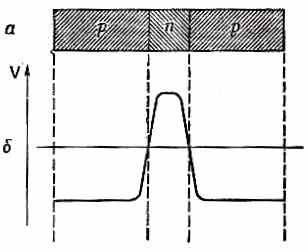
Произведение *qpV* в числителе показателя экспоненты — это как раз та энергия, которая требуется, чтобы пронести заряд *qp* сквозь разность потенциалов *V.*

Точно такое же уравнение существует и для плотностей но­сителей *n*-типа:

C:\Мои документы\gray.jpg

Если мы знаем равновесные плотности в каждом из двух мате­риалов, то любое из этих уравнений даст нам разность потен­циалов на переходе.

Заметьте, что для того, чтобы (12.10) и (12.11) давали оди­наковые значения разности потенциалов *V*, произведение *NpNn* должно быть в *p*-области и в *n*-области одним и тем же.



Фаг. 12.11. Распределение по­тенциала вдоль транзистора, если не приложено напряжение.

(Вспомните, что *qn*=-*qp.)* Но мы еще раньше видели, что это произведение зависит только от температуры и от ширины энергетической щели кристалла. Если обе части кристалла находятся при одинаковой температуре, оба уравнения будут совместны, давая одинаковое значение разности потенциалов.

Но раз между двумя сторонами перехода имеется разность потенциалов, то это напоминает батарейку. Если соединить re-область с *p*-областью проволочкой, может по ней пойдет ток? Это будет замечательно, ведь тогда ток будет идти без остановки, не истощая материала, и мы будем обладать бесконечным источ­ником энергии в нарушение второго закона термодинамики! Но если вы действительно соедините *p*-область с *n*-областью проводами, никакого тока не будет. И легко понять почему.

Возьмем сперва проводничок из материала без примесей. Если подсоединить его к re-области, получится переход, на котором возникнет разность потенциалов. Пусть, скажем, она составит половину всей разности потенциалов между *p-* и *n*-областями. А когда мы подведем нашу чистую проволоку к *p*-области пере­хода, то там снова, на новом переходе, возникнет разность по­тенциалов, опять равная половине падения потенциала на *p*—*n*-переходе. Во всех переходах разности потенциалов так приладятся друг к другу, что никакой ток в схеме не пойдет. И какой бы вы проволокой ни начали соединять обе стороны *p*—*n*-перехода, у вас всегда выйдет два новых перехода, и до тех пор, пока температура всех переходов одинакова, скачки по­тенциалов на переходах будут компенсировать друг друга и тока не будет. Оказывается, однако (если вы рассчитаете все детали), что если у части переходов температура отличается от температуры других частей, то ток пойдет. Этот ток будет нагревать одни переходы и охлаждать другие, и тепловая энер­гия будет превращаться в электрическую. Это явление опреде­ляет собой действие термопар, применяемых для измерения температуры, и термоэлектрических генераторов. То же явле­ние используется и в небольших холодильниках.

Но если мы не в состоянии измерять разность потенциалов между двумя сторонами *p—n*-перехода, то откуда уверенность, что перепад потенциалов, показанный на фиг. 12.9, действитель­но существует? Ну, во-первых, можно осветить переход светом. Когда фотоны света поглощаются, они могут образовать пару электрон — дырка. В том сильном электрическом поле, кото­рое существует в переходе (равном наклону потенциальной кривой на фиг. 12.9), дырку затянет в *p*-область, а электрон — в *n*-область. Если теперь обе стороны перехода подсоединить ко внешней цепи, эти добавочные заряды вызовут ток. Энергия света перейдет в электрическую энергию перехода. Солнечные батареи, которые генерируют для спутников электрическую мощность, действуют именно на этом принципе.

Обсуждая свойства полупроводникового перехода, мы пред­полагали, что дырки и электроны действуют более или менее независимо, если не считать того, что они как-то все же приходят в тепловое равновесие. Когда мы говорили о токе, получающемся при освещении перехода светом, то предполагали, что электрон или дырка, образующиеся в области перехода, прежде чем анни­гилировать с носителем противоположной полярности, успеют попасть в само тело кристалла. В непосредственной близости от перехода, где плотности носителей обоих знаков примерно одинаковы, аннигиляция пар электрон — дырка (называемая часто «рекомбинацией») — очень важный эффект, и его следует принимать во внимание при детальном анализе полупроводни­кового перехода.

Мы предполагали, что дырка или электрон, образуемые в области перехода, имеют хороший шанс еще до рекомбинации попасть в основное тело кристалла. Типичное время, требую­щееся электрону или дырке для того, чтобы найти противопо­ложного партнера и аннигилировать, для типичных полупро­водниковых материалов колеблется между 10-3 и 10-7 *сек.* Кста­ти, это время много больше времени среднего свободного пробега τ между столкновениями с узлами рассеяния в кри­сталле,— того времени, которым мы пользовались при анализе проводимости. В типичном *p—n*-переходе время, требуемое на то, чтобы смести в тело кристалла электрон или дырку, воз­никшую в области перехода, намного меньше времени рекомби­нации. Поэтому большинство пар вливается во внешний ток.

**§ 5. Выпрямление на полупроводниковом переходе**

Теперь мы покажем, как получается, что *p—n*-переход дей­ствует как выпрямитель. Если мы к переходу приложим напря­жение одного знака, то пойдет большой ток, если другого — тока почти не будет. А если к переходу приложить переменное напряжение, то ток пойдет только в одну сторону — он «выпря­мится». Посмотрим еще раз, что получается в условиях равно­весия, описанных кривыми фиг. 12.9. В материале *p*-типа имеет­ся высокая концентрация *Np* положительных носителей. Эти носители повсюду диффундируют, и некоторое их количество каждую секунду приближается к переходу. Этот ток положи­тельных носителей, достигающих перехода, пропорционален *Np.* Большая часть их, однако, разворачивается обратно, не будучи в состоянии взять высокий потенциальный холм у пере­хода, и только доля C:\Мои документы\gray.jpgих проходит дальше. Имеется также ток положительных носителей, приближающихся к пе­реходу с другой стороны. Этот ток тоже пропорционален плот­ности положительных носителей в *n*-области, но здесь плотность носителей намного ниже плотности в *p*-области. Когда положи­тельные носители приближаются из *n*-области к переходу, они обнаруживают перед собой холм с отрицательным склоном и сходу соскальзывают под гору, на *p*-сторону перехода. Обо­значим этот ток *I*0. В условиях равновесия токи в обе стороны одинаковы. Значит, можно ожидать, что будет выполняться следующее соотношение:

C:\Мои документы\gray.jpg

Вы замечаете, что оно на самом деле совпадает с (12.10). Мы просто вывели его другим способом.

Допустим, однако, что мы снизили напряжение на *n*-стороне перехода на величину ΔV — это можно сделать, приложив к переходу внешнюю разность потенциалов. Теперь разница в потенциалах по обе стороны потенциального холма уже не *V*, а *V-*Δ*V*. У тока положительных носителей из *p*-области в *n*-область теперь в показателе экспоненты будет стоять именно эта разность потенциалов. Обозначая этот ток через *I*1; имеем

C:\Мои документы\gray.jpg

Этот ток превосходит ток *I*0 в C:\Мои документы\gray.jpgраз. Значит, между *I*1 и *I*0 существует следующая связь:

C:\Мои документы\gray.jpg

Ток из *p*-области при приложении внешнего напряжения Δ*V* растет по экспоненте. А ток положительных носителей из *n-*области остается постоянным, пока Δ*V* не слишком велико.

Достигая барьера, эти носители по-прежнему будут видеть перед собой идущий под гору потенциал и будут все скатываться в *p*-область. (Если Δ*V* больше естественной разности потенциа­лов *V,* положение может измениться, но что случается при таких высоких напряжениях, мы рассматривать не будем.) В итоге ток положительных носителей *I*, текущий через переход, будет определяться разницей токов в обе стороны:

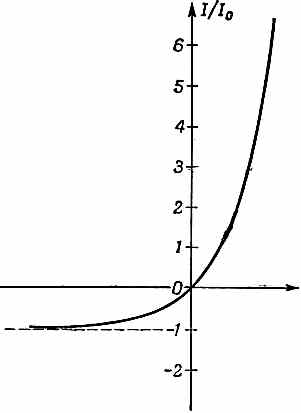
C:\Мои документы\gray.jpg

Дырочный ток *I* течет в *n*-область. Там дырки диффундируют в самую глубь *n*-области и могут, вообще говоря, аннигилиро­вать на основной массе отрицательных носителей электронов. Убыль электронов, теряемых при этой аннигиляции, воспол­няется током электронов из внешнего контакта материала *n*-типа.

Когда Δ*V*=0, то и ток в (12.14) равен нулю. Если Δ*V* положительна, ток с напряжением резко растет, а если Δ*V* отрицательна, знак тока меняется, но экспоненциальный член вскоре становится пренебрежимо малым, и отрицательный ток никогда не превышает *I*0 — величины, которая, по нашему предположению, очень мала. Этот обратный ток *I*0 ограничен той слабой плотностью, которой обладают неосновные носители в *n*-области перехода.

Если вы проведете в точности тот же анализ для тока отри­цательных носителей, текущего через переход, сперва без внешней разности потенциалов, а после с небольшой приложен­ной извне разностью потенциалов Δ*V*, то для суммарного электронного тока вы опять получите уравнение, похожее на (12.14). Поскольку полный ток есть сумма токов носите­лей обоего рода, то (12.14) применимо и к полному току, если только отождествить *I*0 с максимальным током, кото­рый может течь при переме­не знака напряжения.

Вольтамперная характеристика (12.14) показана на фиг. 12.10.



*Фиг. 12.10. Зависимость тока через переход от приложенного к нему напряжения.*

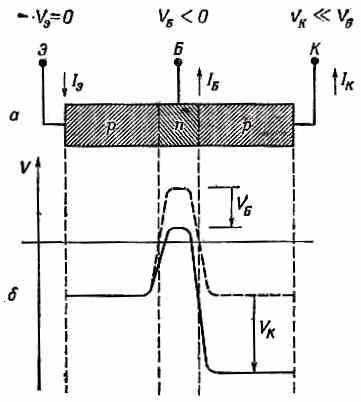
Она демонстрирует нам типичное поведение кристаллических диодов, подобных тем, которые применяются в современных вычислительных машинах. Нужно только заметить, что (12.14) справедливо лишь при невысоких напряжениях. При напряже­ниях, сравнимых с естественной внутренней разностью потен­циалов *V* (или превышающих ее), в игру входят новые явления и ток уже не подчиняется столь простому уравнению.

Быть может, вы вспомните, что в точности такое же уравне­ние мы получили, говоря о «механическом выпрямителе» — храповике и собачке [см. гл. 46 (вып. 4)]. Мы получали те же уравнения, потому что лежащие в их основе физические про­цессы весьма схожи.

**§ 6. Транзистор**

Пожалуй, самым важным применением полупроводников является изобретение транзистора. Состоит он из двух полу­проводниковых переходов, расположенных вплотную друг к другу, и работа его частично опирается на те же принципы, которые мы только что описывали, говоря о полупроводниковом диоде — выпрямляющем переходе. Предположим, что мы изго­товили из германия небольшой брусочек, составленный из трех участков: *p*-область, *n-*область и опять *p*-область (фиг. 12.11,а). Такое сочетание именуется *p—n—p*-транзистором. Ведут себя эти переходы в транзисторе примерно так же, как описывалось в предыдущем параграфе. В частности, в каждом переходе должен наблюдаться перепад потенциала — падение потенци­ала из *n*-области в каждую из *p*-областей. Если внутренние свой­ства обеих *p*-областей одинаковы, то потенциал вдоль брусочка меняется так, как показано на фиг. 12.11,*б*.

Теперь представьте себе, что каждая из трех областей под­ключена к источнику внешнего напряжения (фиг. 12.12,*а*). Будем относить все напряжения к контакту, присоединенному к левой *p*-области, так что на этом контакте потенциал будет равен нулю.



Фиг. 12.12. Распределение потенциала в работающем транзисторе.

Этот контакт мы назовем *эмиттером; n*-область называется *базой,* или *основанием,* к ней подведен слабый отри­цательный потенциал; правая *p*-область называется *коллекто­ром,* к ней подведен намного больший отрицательный потенциал. В таких условиях потенциал будет меняться вдоль кристалла так, как показано на фиг. *12.12,б.*

Посмотрим сначала, что происходит с положительными носителями, потому что именно их поведение в первую очередь управляет работой *p—n—p*-транзистора. Раз потенциал эмит­тера более положителен, нежели потенциал базы, то из эмит­тера в базу пойдет ток положительных носителей. Ток этот до­вольно велик, потому что перед нами переход, работающий при «подталкивающем напряжении» (что отвечает правой половине кривой на фиг. 12.10). При таких условиях положительные но­сители, или дырки, будут «эмиттироваться» из *p*-области в *n*-область. Может показаться, что этот ток вытечет из *n*-области через контакт Б. Но здесь-то и таится секрет транзи­стора. Эта *n*-область делается очень узкой, толщиной обычно в 10-3 *см*, а то и уже, намного уже, чем ее поперечные размеры. Следовательно, у дырок, попавших в га-область, имеется очень большой шанс успеть продиффундировать через всю область до следующего перехода, прежде чем они аннигилируют с элект­ронами re-области. А когда они подойдут к правой границе *n*-области, они обнаружат перед собой крутой спуск с потен­циального холма и сходу ссыплются в правую *p*-область. Эта сторона кристалла называется *коллектором,* потому что он собирает дырки после того, как они проскользнут через *n*-область. В типичном транзисторе почти весь дырочный ток, вы­шедший из эмиттера и попавший на базу, собирается в области коллектора, и только жалкие остатки (доли процента) вклю­чаются в суммарный ток с электрода базы. Сумма токов из базы и коллектора, естественно, равна току через эмиттер.

Теперь представим себе, что получится, если мы будем слегка менять потенциал Vб контакта. Поскольку мы находимся на сравнительно крутой части кривой фиг. 12.10, легкие изменения потенциала Vб довольно значительно отразятся на токе эмиттера *I*Э. А напряжение на коллекторе VK намного более отрицательно, чем напряжение на электроде базы, и эти слабые изменения потенциала не скажутся заметно на крутом потенциальном холме между базой и коллектором. Большинство положительных носителей, испущенных в *n*-область, по-прежнему будут попадать в коллектор. Итак, изме­нениям потенциала электрода базы будут отвечать изме­нения тока через коллектор *I*K. Существенно, однако, что ток через базу *I*Б все время будет составлять лишь небольшую часть тока через коллектор. Транзистор — это усилитель; не­большой ток *I*б, проходящий через электрод базы, приведет к сильному току (раз в 100 сильней, а то и больше) через коллек­торный электрод.

А как же обстоит дело с электронами — с отрицательными носителями, которыми мы до сих пор пренебрегали? Заметьте, во-первых, что между базой и коллектором мы не ожидаем сколько-нибудь заметного тока электронов. При столь большом отрицательном напряжении на коллекторе электронам из базы пришлось бы карабкаться на очень высокий потенциальный холм, и вероятность этого очень мала. Ток электронов на кол­лектор очень слаб.

Но, с другой стороны, электроны с базы *могут* переходить в область эмиттера. Можно ожидать, что электронный ток в этом направлении будет сравним с дырочным током от эмиттера к базе. Такой электронный ток пользы не приносит, даже на­оборот, потому что он увеличивает полный ток через базу, нужный для того, чтобы ток дырок к коллектору имел данную величину. Поэтому транзистор устраивается так, чтобы ток электронов к эмиттеру свести до самой малости. Электронный ток пропорционален *Nn* (базы)—плотности отрицательных носи­телей в веществе базы, тогда как дырочный ток от эмиттера зависит от *Np* (эмиттера)—плотности положительных носителей в области эмиттера. Сравнительно небольшим добавлением примеси в материал *n-*типа *Nn* (базы) может быть сделано много меньше, чем *Np* (эмиттера). (Кроме того, сильно помогает очень малая толщина базы, потому что выметание дырок из этой области в коллектор заметно увеличивает средний дырочный ток от эмиттера к базе, не затрагивая электронного тока.) В итоге ток электронов через переход эмиттер — база может быть сделан много слабее тока дырок, так что электроны в ра­боте *p—n—p*-транзистора заметной роли не играют. Токи в основном определяются движением дырок, и транзистор иг­рает роль усилителя.

Можно также сделать транзистор, поменяв на фиг. 12.11 местами материалы *p*-типа и *n*-типа. Тогда получится так назы­ваемый *n—p*—*n*-транзистор. В таком транзисторе основной ток — это ток электронов, текущий от эмиттера к базе, а от­туда — в коллектор. Разумеется, все рассуждения, которые мы проводили для *p*—*n—p-*транзистора, в равной мере приме­нимы и к *n*—*p—n*-транзистору, если только переменить знаки потенциалов электродов.

\*Во многих книжках эта же энергетическая диаграмма истолковывает­ся иначе. Шкалу энергий относят только к электронам. Вместо того чтобы думать об энергии дырки, говорят о той энергии, которую имел бы элект­рон, если бы он заполнил дырку. Эта энергия меньше, нежели энергия сво­бодного электрона, причем как раз на ту величину, которая показана на фиг. 12.5. При такой интерпретации шкалы энергий ширина энергетиче­ской щели — это наименьшая энергия, которой нужно снабдить элект­рон, чтобы перевести его из связанного состояния в зону проводимости.

***Литература: Ч. Киттель, Введение в фи­зику твердого тела, М.—Л., 1958, гл. 13, 14, 18.***

***Главa 13***

**ПРИБЛИЖЕНИЕ НЕЗАВИСИМЫХ ЧАСТИЦ**

[**§ 1. Спиновы****е волн**](#a1)

[**§ 2. Две спиновые** **волны**](#a2)

[**§ 3. Независим****ые частицы**](#a3)

[**§ 4. Молекул****а бензола**](#a4)

[**§ 5. Еще немног****о органической химии**](#a5)

[**§ 6. Другие приме­н****ения прибли­жения**](#a6)

**§ 1. Спиновые волны**

В гл. 11 мы разработали теорию распро­странения электрона или любой другой «частицы», например атомного возбуждения, вдоль кристаллической решетки. В предыдущей главе мы эту теорию применили к полупроводникам. Но хотя электронов у нас всегда было много, мы тем не менее неизменно пренебрегали каким-либо взаимодействием между ними. Это, конеч­но, было не более чем приближение, и мы сейчас постараемся глубже разобраться в самой мысли о том, что взаимодействием между элект­ронами разрешается пренебрегать. Мы к тому же воспользуемся возможностью продемонстри­ровать новые применения теории распростране­ния частиц. Поскольку мы по-прежнему будем продолжать пренебрегать взаимодействием меж­ду частицами, то фактически в этой главе будет очень мало нового, разве что новые при­ложения. Однако первый пример, который мы хотим рассмотреть,— это пример, в котором есть возможность совершенно точно выписать правильные уравнения для случая, когда «частиц» больше чем одна. Из них мы сможем увидеть, как делается приближение пренебре­жения взаимодействием. Впрочем, мы не будем слишком тщательно анализировать эту про­блему.

В качестве первого примера рассмотрим «спиновую волну» в ферромагнитном кристалле.

Теории ферромагнетизма мы касались в гл.36 (вып. 7). При нулевой температуре все спины электронов, которые дают вклад в магнетизм всего ферромагнитного кристалла, параллельны между собой. Между спинами существует энер­гия взаимодействия, которая ниже всего тогда, когда все спины направлены вниз. Но при ненулевой темпера­туре имеется какая-то вероятность того, что часть спинов перевернется. Эту вероятность тогда мы приближенно под­считывали. На этот раз мы разовьем квантовомеханическую теорию явления, чтобы знать, что делать, если нужно будет решить задачу точнее. Но мы все еще будем прибегать к идеали­зации; будем считать, что электроны расположены вблизи ато­мов, а спины взаимодействуют только со своими соседями.

Рассмотрим такую модель: пусть в каждом атоме все элект­роны, кроме одного, спарены, и весь магнитный эффект обязан тому, что в каждом атоме остается один неспаренный электрон со спином 1/2. Вообразим еще, что эти электроны расположены в тех самых узлах решетки, где находятся атомы. Модель в об­щих чертах отвечает металлическому никелю.

Кроме того, допустим, что любая пара вращающихся со­седей-электронов взаимодействует друг с другом и что каж­дое такое взаимодействие добавляет в энергию системы по сла­гаемому;

C:\Мои документы\gray.jpg

Здесь σпредставляют собой спины, а суммирование идет по всем парам соседей-электронов. Мы уже говорили о по­добной энергии взаимодействия, рассматривая сверхтонкое расщепление водорода, вызываемое взаимодействием магнитных моментов электрона и протона в атоме водорода. Тогда мы выра­жали это в виде *А*σ*е*•σ*р.* На этот раз для данной пары, скажем для электронов из атома № 4 и из атома № 5, гамильтониан имеет вид —*K*σ4•σ5. Каждая такая пара дает по одному слагае­мому, а весь гамильтониан (как это бывает и с классическими энергиями) есть сумма таких слагаемых для каждой взаимо­действующей пары. Энергия написана с множителем —*К,* так что положительное *К* отвечает ферромагнетизму, т. е. тому слу­чаю, когда наинизшая энергия получается при параллельности соседних спинов. В реальном кристалле могут появиться и другие слагаемые — взаимодействие с соседом через *одного* и т. д., но на нашем уровне такие усложнения нам не пона­добятся.

Располагая гамильтонианом (13.1), мы обладаем и полным описанием ферромагнетика (в рамках нашего приближения), так что из него должны получиться все магнитные свойства. Кроме того, из него же должны получаться и термодинамические свойства при намагничивании. Если мы сможем определить все уровни энергии, то можно будет найти и свойства кристалла при температуре *Т,* основываясь на том, что для системы вероят­ность оказаться в данном состоянии с энергией *Е* пропорцио­нальна *.* Эта задача никогда не была решена до конца.

Некоторые задачи мы сможем разобрать на простом примере, когда все атомы лежат на одной прямой — случай одномерной решетки. Все эти представления вы потом легко сможете распро­странить на трехмерную решетку. Возле каждого атома имеется электрон; у него есть два возможных состояния — либо спином вверх, либо вниз, и вся система описывается перечислением на­правлений спинов. В качестве гамильтониана системы возьмем оператор энергии взаимодействия. Интерпретируя спиновые векторы (13.1) как сигма-операторы, или сигма-матрицы, мы напишем для линейной решетки

C:\Мои документы\gray.jpg

В этом уравнении для удобства написан множитель *А/2* (так что некоторые из дальнейших уравнений в точности совпадут с уравнениями из гл. 11).

Каково же наинизшее состояние системы? Состояние наинизшей энергии это то состояние, когда все спины параллельны, скажем все [глядят вверх](#прим1). Это состояние можно обозначить ! ... + + + + ...>, или|осн.), чтобы подчеркнуть, что оно «ос­новное», наинизшее. Энергию этого состояния легко себе пред­ставить. Можно, например, расписать все сигма-векторы через σ^*х,* σ*^у* и σ^*г,* аккуратно подсчитать, каков вклад каждого из них в энергию основного состояния, и все затем сложить. Путь, однако, можно сильно сократить. В гл. 10, § 2 (вып. 8) мы ви­дели, что σ*^i*•σ*^j*может быть выражено через спин-обменный опе­ратор Паули:

C:\Мои документы\gray.jpg

где оператор р^ijспин-°бм обменивает спины *i*-го и *j*-го электронов. После этой подстановки гамильтониан обращается в

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь уже легко подсчитать, что происходит в различных со­стояниях. Например, если и *i* и *j* смотрят вверх, то обмен спи­нами ничего не меняет, так что *P^ij,* действуя на состояние, опять приводят к тому же состоянию, т. е. оно равнозначно умножению на +1. Выражение *Р^ij -*1/2 просто равно 1/2. (В дальнейшем слова «спин-обм» над *Р* мы писать не будем.)

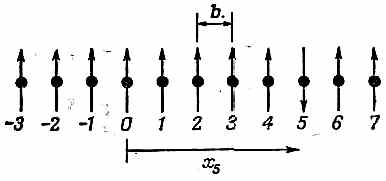
В основном состоянии все спины направлены вверх; значит, обмен любой парой спинов приводит опять к исходному состоя­нию. Основное состояние является стационарным. Если подейст­вовать на него гамильтонианом, получится опять то же состоя­ние, умноженное на сумму чисел *—(А/2),* по одному на каждую пару спинов. Иначе говоря, энергия системы в основном состоя­нии составляет по —*А/2* на атом.

Теперь подсчитаем энергии некоторых возбужденных состоя­ний. Удобно будет отсчитывать энергии от основного состояния, т. е. в качестве нулевой энергии выбрать энергию основного состояния. Этого можно добиться, добавив к каждому слагаемо­му в гамильтониане по энергии *А/2.* Тогда 1/2 в (13.4) просто заменится единицей. Наш новый гамильтониан будет равен

C:\Мои документы\gray.jpg

При таком гамильтониане энергия низшего состояния равна нулю; спин-обменный оператор равнозначен умножению на единицу (для основного состояния), что сокращается с единицей в каждом слагаемом.

Для описания состояний, отличных от основного, нам пона­добится своя совокупность базисных состояний. Удобно подойти к делу так: сгруппировать состояния в соответствии с тем, у скольких электронов спин направлен вниз: у одного ли, у двух и т. д. Конечно, состояний, когда один спин направлен вниз, очень много: он может быть опрокинут, скажем, у атома № 4 или у № 5, или у № 6... И можно, конечно, в качестве базисных состояний выбрать именно такие состояния, обозначив их |4>, |5>, | 6>, ... Однако для дальнейшего удобнее, если мы будем отмечать «из ряда вон выходящий атом» (тот, у которого спин направлен вниз) его координатой *х.* Иначе говоря, мы опре­делим состояние | *х*5*>* как такое, в котором все электроны вра­щаются спинами вверх, и один только (тот, что возле атома в точке *х*5*)* вращается спином вниз (фиг. 13.1).



*Фиг. 13.1. Базисное состояние* |*x*5> *системы спинов, расположенных по одной линии.*

*Все спины направлены вверх, а тот, что в х*5*, перевернут.*

Вообще, |*хn*> будет обозначать состояние с одним перевернутым спином, рас­положенным в координате *хn n*-гоатома.

Как же действует гамильтониан (13.5) на состояние |*x*5>? Один из членов гамильтониана это, скажем, — *А (Р^7,8*-1). Оператор P^7,8 обменивает спинами два соседних атома № 7 и № 8. Но в состоянии |*x*5> они оба направлены вверх, так что ничего не меняется; Р^7,8 равнозначно умножению на единицу:

C:\Мои документы\gray.jpg

Отсюда следует

C:\Мои документы\gray.jpg

Стало быть, все члены гамильтониана, кроме тех, куда вхо­дит атом № 5, дадут нуль. Операция P^4,5, действуя на со­стояние |*x*5>, обменивает спинами атом № 4 (со спином вверх) и атом № 5 (со спином вниз). В результате появляется со­стояние, в котором все спины смотрят вверх, кроме атома в точке 4. Иначе говоря,

C:\Мои документы\gray.jpg

Точно так же

C:\Мои документы\gray.jpg

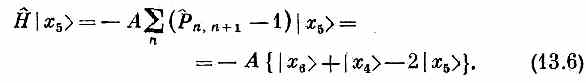
Значит, изо всего гамильтониана выживут только члены

C:\Мои документы\gray.jpg

Действуя на |x5>, они дадут соответственно

C:\Мои документы\gray.jpg

В итоге

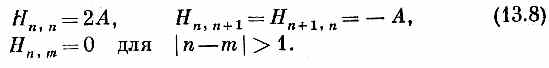


Когда гамильтониан действует на состояние |*x*5>, то возни­кает некоторая амплитуда оказаться в состояниях | *x*4> и |*х*6>*.* Это просто означает, что существует определенная амплитуда того, что направленный книзу спин перепрыгнет к соседнему атому. Значит, из-за взаимодействия между спинами, если вна­чале один спин был направлен вниз, имеется некоторая ве­роятность того, что позднее вместо него вниз будет смотреть другой. При действии на состояние | *хn*>гамильтониан дает

C:\Мои документы\gray.jpg

Заметьте, в частности, что если взять полную систему состоя­ний только с одним спином-«перевертышем», то они будут перемешиваться только между собой. Гамильтониан никогда не перемешает эти состояния с другими, в которых спинов-«перевертышей» больше. Пока вы только обмениваетесь спинами, вы никогда не сможете изменить общего количества перевертышей. Удобно будет использовать для гамильтониана матричное обозначение, скажем, C:\Мои документы\gray.jpg

уравнение (13.7) эквивалентно следующему:



Каковы же теперь уровни энергии для состояний с одним перевернутым спином? Пусть, как обычно, *Сn* — амплитуда того, что некоторое состояние |ψ> находится в состоянии |*xn*>. Если мы хотим, чтобы |ψ> было состоянием с определенной энергией, то все *Сn* обязаны одинаково меняться со временем, а именно по правилу

C:\Мои документы\gray.jpg

Подставим это пробное решение в наше обычное уравнение Гамильтона

C:\Мои документы\gray.jpg

используя в качестве матричных элементов (13.8). Мы, конечно, получим бесконечное количество уравнений, но все их можно будет записать в виде

C:\Мои документы\gray.jpg

Перед нами опять в точности та же задача, что и в гл. 11, только там, где раньше стояло *Е*0*,* теперь стоит 2*А.* Решения отвечают амплитудам *Сn* (амплитудам с перевернутым спином), которые распространяются вдоль решетки с константой распростране­ния *k* и энергией

*Е*=2*A*(1-coskb)*,* (13.12)

где *b* — постоянная решетки.

Решения с определенной энергией отвечают «волнам» перево­рота спина, называемым «спиновыми волнами». И для каждой длины волны имеется соответствующая энергия. Для больших длин волн (малых k*)* эта энергия меняется по закону

*Е=Аb*2*k*2*.* (13.13)

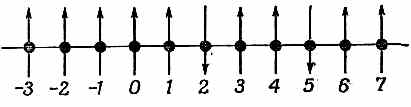
Как и прежде, мы можем теперь взять локализованный волно­вой пакет (содержащий, однако, только длинные волны), кото­рый соответствует тому, что электрон-«перевертыш» окажется в такой-то части решетки. Этот перевернутый спин будет вести себя как «частица». Так как ее энергия связана с *k* формулой (13.13), то эффективная масса «частицы» будет равна

C:\Мои документы\gray.jpg

Такие «частицы» иногда именуют «магнонами».

**§ 2. Две спиновые волны**

Теперь мы хотели бы выяснить, что происходит, когда име­ется пара перевернутых спинов. Опять начнем с выбора системы базисных состояний. Выберем такие состояния, когда спины перевернуты в каких-то двух местах (так, как на фиг. 13.2).



*Фиг. 13.2. Состояния с двумя переверну­тыми спинами.*

Эти состояния можно, скажем, отмечать *x*-координатами тех двух узлов решетки, в которых оказались электроны с пе­ревернутым спином. То, что на рисунке, можно обозначить |*х*2*, х*5>*.* В общем случае базисные состояния будут |*хn, хm*>— дважды бесконечная совокупность! При таком способе описания состояние | *x*4*, х*9*>* и состояние | *х*9*, x*4> совпадают, потому что каждое из них просто говорит, что в точках 4 и 9 спин перевер­нут; порядок их не имеет значения. Не имеет также смысла состояние | *x*4, *х*4> *—* такого просто быть не может. Любое со­стояние |ψ> мы можем описать, задав амплитуды того, что оно обнаружится в одном из базисных состояний.

Итак, *Сm,n=<хm,хn*|ψ> теперь означает амплитуду того, что система в состоянии |ψ> окажется в состоянии, когда у электронов, стоящих вблизи *m*-го и *n*-го атомов, спины смотрят вниз. Сложности, которые теперь возникнут, будут связаны не с усложнением идей,— это будут просто усложнения в бухгалтерии. (Одна из сложностей квантовой механики как раз и состоит в громоздкости бухгалтерии. Чем больше спинов перевернется, тем сложнее станут обозначения, тем больше будет индексов, тем страшнее будут выглядеть уравнения; но сами идеи вовсе не обязательно должны усложниться.)

Уравнения движения спиновой системы — это дифферен­циальные уравнения для *Сn,m*:

C:\Мои документы\gray.jpg

Пусть нам опять нужно найти стационарные состояния. Как обычно, производные по времени обратятся в *Е,* умноженное на амплитуду, a *Cm,n,* заменятся коэффициентами *аm,n.* Затем надо аккуратно рассчитать влияние *Н* на состояние с перевернутыми спинами *т* и *п.* Это сделать нетрудно. Представьте на минуту, что *т* далеко от *n,* так что не нужно думать, что будет, если ... и т. д. Обменная операция, производимая в точке *хn,* передвинет перевернутый спин либо к *(n*+1)-му, либо к (*n*-1)-му атому, так что имеется ненулевая амплитуда того, что теперешнее состояние получилось из состояния *|хm, хn*+1>*,* и амплитуда того, что оно произошло из состояния *|хm, хn*-1>*.* Но передви­нуться мог и второй спин, так что не исключена и какая-то амплитуда того, что *Сm,n* питается от С*m*+1,*n* или от *Сm-*1*,n.* Все эти эффекты должны быть одинаковы. Окончательный вид гамильтонова уравнения для *Сm.n* таков:

C:\Мои документы\gray.jpg

Это уравнение пригодно всегда, за исключением двух слу­чаев. При *m*=*n* уравнения вообще нет, а при *m*=*n*±1 пара членов в (13.16) должна пропасть. *Этими исключениями мы пренебрежем.* Мы просто будем игнорировать тот факт, что не­которые из этих уравнений слегка меняются. Ведь как-никак кристалл считается бесконечным и слагаемых в гамильтониане бесчисленно много; пренебрежение некоторым их числом вряд ли сильно на чем-то скажется. Итак, в первом грубом прибли­жении давайте позабудем об изменениях уравнений. Иными сло­вами, допустим, что (13.16) верно при всех *m* и *n,* даже когда *m* и *n* стоят по соседству. *Это самое существенное в нашем прибли­жении.*

Теперь уже решение отыскать нетрудно. Мы немедленно по­лучаем

C:\Мои документы\gray.jpg

где

C:\Мои документы\gray.jpg

а

C:\Мои документы\gray.jpg

Поразмыслим минутку о том, что было бы, если бы у нас были две *независимые, отдельные* спиновые волны (как в пре­дыдущем параграфе), соответствующие *k=k*1и *k*=*k*2; их энер­гии из (13.12) имели бы вид

C:\Мои документы\gray.jpg

и

C:\Мои документы\gray.jpg

Заметьте, что энергия *Е* в (13.19) является как раз их суммой:

C:\Мои документы\gray.jpg

Иными словами, наше решение можно толковать следующим образом. Имеются две частицы, т. е. пара спиновых волн, одна из которых обладает импульсом, описываемым числом *k*1a другая — числом *k*2; энергия системы равна сумме энергий этих двух объектов. Обе частицы действуют совершенно независи­мо. Вот и все, что в этом есть — и ничего больше.

Конечно, мы сделали некоторые приближения, но в данный момент мы не будем обсуждать точность нашего ответа. Вы, однако, чувствуете, что в кристаллах разумного размера с миллиардами атомов и, стало быть, с миллиардами слагаемых в гамильтониане большой ошибки от пренебрежения немногими слагаемыми не выйдет. Если бы, конечно, перевернутых спинов стало так много, что их плотность была бы заметной, то при­шлось бы позаботиться и о поправках.

(Интересно, что в случае, когда перевернутых спинов только *два,* можно написать и точное решение. Но результат особой важности не представляет. Просто интересно, что в этом случае уравнения можно решить точно. Решение таково:

C:\Мои документы\gray.jpg

с энергией

C:\Мои документы\gray.jpg

и с волновыми числами *kc* и *k,* связанными с *k*1 и *k*2формулами

*k*1= *kc-k,*  *k*2*=kc+k.* (13.22)

В этом решении отражено и «взаимодействие» пары спинов. Оно описывает тот факт, что когда спины сближаются, возникает какая-то вероятность их рассеяния. Поведение спинов очень по­хоже на взаимодействие частиц. Но подробная теория их рас­сеяния выходит за пределы того, о чем мы здесь собрались го­ворить.)

**§ 3. Независимые частицы**

В предыдущем параграфе мы написали гамильтониан (13.15) для двухчастичной системы. Затем, пользуясь приближением, эквивалентным пренебрежению каким-либо «взаимодействием» между двумя частицами, мы нашли стационарные состояния, описываемые формулами (13.17) и (13.18). Это состояние по­просту есть произведение двух одночастичных состояний. Но решение, которое мы написали для *аm,n* [формула (13.18)], на самом деле удовлетворить нас не может. Мы с самого начала подчеркивали, что состояние | *х*9*, x*4> *не отличается* от состоя­ния |*x4, x*9), что *порядок хm* и *хn* неважен. Вообще говоря, алгеб­раическое выражение для амплитуды *Сm,n* не должно меняться от перестановки значений *хm* и *хn,* потому что она не изменяет состояния. В любом случае она будет представлять амплитуду того, что спин, направленный вниз, обнаружится в *хm* и в *хn.*

Но обратите внимание, что (13.18) *несимметрично* по *хm* и *хn,* поскольку *k*1и *k*2, вообще говоря, различны.

Все дело в том, что мы не заставили наше решение (13.15) подчиниться этому добавочному условию. К счастью, пока не­трудно все исправить. Заметьте, во-первых, что ничуть не хуже формулы (13.18) другое решение уравнения Гамильтона:

C:\Мои документы\gray.jpg

И даже энергия здесь та же самая, что была в (13.18). Значит, любая линейная комбинация (13.18) и (13.23) также будет ре­шением системы и будет обладать по-прежнему энергией, давае­мой (13.19). Решение, которое нужно выбрать по требованиям симметрии,—просто сумма (13.18) и (13.23):

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь при данных *k*1и *k*2 амплитуда *Сm,n* не зависит от того, в каком порядке мы берем *хm* и *хn*;если мы случайно поставим *хm* и *хn* в обратном порядке, мы получим ту же амплитуду. И на­ше толкование уравнения (13.24) на языке «магнонов» тоже ста­нет иным. Уже нельзя говорить, что уравнение представляет *одну* частицу с волновым числом *k*1 и *другую* частицу с волновым числом *k*2. Амплитуда (13.24) представляет *одно* состояние с двумя частицами (магнонами). *Состояние* характеризуется дву­мя волновыми числами *k*1и *k*2*.* Наше решение выглядит как со­ставное состояние одной частицы с импульсом *р*1= *k*1/*h* и дру­гой частицы с импульсом *р*2*=k*2*/h,* но в этом состоянии нельзя сказать, где какая частица.

В этот момент полезно вспомнить гл. 2 (вып. 8) и наш рас­сказ о тождественных частицах. Мы просто только что показали, что частицы спиновых волн (магноны) ведут себя как тождест­венные бозе-частицы. Все амплитуды обязаны быть симметрич­ны по координатам двух частиц; это все равно, что сказать, что после «обмена двумя частицами» мы снова получим ту же амплитуду с тем же знаком. Но вы можете подумать: «Почему же мы все-таки решили в (13.24) *сложить* два члена? Почему не вычесть?» Ведь при знаке минус обмен *хm* и *хn* просто изменил бы знак *аm,n,* а это не в счет, это не имеет значения. Но ведь об­мен *хm* с *хn ничего не меняет —* все электроны кристалла оста­нутся там же, где и были, так что даже для перемены знака нет, казалось бы, никакого повода. Но это, конечно, [плохой ар­гумент](#прим2).

Наше обсуждение имело двойную цель: во-первых, расска­зать вам кое-что о спиновых волнах; во-вторых, продемонстри­ровать состояние, амплитуда которого равна *произведению* двух амплитуд, а энергия равна *сумме* энергий, отвечающих этим амплитудам. Для *независимых частиц* амплитуда получается умножением, а энергия — сложением. Почему сложением — легко понять. Энергия — это коэффициент при *t* в мнимом пока­зателе экспоненты; она пропорциональна частоте. Если пара объектов что-то совершает, один с амплитудой *,* а другой . с амплитудой *,* и если амплитуда того, что обе эти вещи произойдут вместе, является произведением отдельных ампли­туд, то в произведении появится единственная частота, равная сумме двух частот. Энергия, отвечающая произведению ампли­туд, есть сумма обеих энергий.

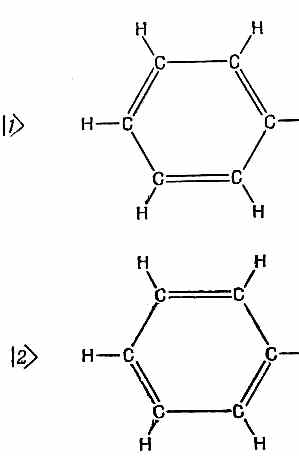
Нам понадобилось довольно долго говорить, чтобы сообщить очень простую вещь: когда вы не учитываете взаимодействия между частицами, вы вправе рассматривать каждую частицу независимо. Они могут отдельно существовать во всевозможных состояниях, в которых они пребывали бы и порознь, и давать тот же вклад в энергию, какой давали бы порознь. Однако сле­дует помнить, что если частицы тождественны, то они могут вести себя как бозе- или ферми-частицы в зависимости от за­дачи. Например, пара электронов, добавленная к кристаллу, ведет себя как ферми-частицы. Обмен местоположениями двух электронов приводит к перемене знака амплитуды. В уравне­нии, соответствующем (13.24), между двумя слагаемыми стоит знак минус. Как следствие этого: две ферми-частицы не могут пребывать в точности в одних и тех же условиях — с одинако­выми спинами и одинаковыми *k.* Амплитуда такого состояния нуль.

**§ 4. Молекула бензола**

Хотя квантовая механика снабжает нас основными закона­ми, определяющими строение молекул, эти законы, однако, удается точно применить лишь к самым простым соединениям. Поэтому химики разработали различные приближенные спосо­бы расчета некоторых из свойств сложных молекул. Мы хотим здесь рассказать, как химики-органики применяют приближе­ние независимых частиц. Начнем с молекулы бензола. Мы ее рассматривали с другой точки зрения в гл. 8 (вып. 8). Тогда мы воспользовались приближенным представлением молекулы в виде системы с двумя состояниями, базисные состояния которой показаны на фиг. 13.3. Имеется кольцо из шести углеродов, к каждому из которых приделано по водороду. По принятой схеме валентных связей необходимо допустить, что между поло­виной атомов углерода имеются двойные связи и что в низших энергетических условиях воз­никают две возможности, по­казанные на рисунке. Но, кроме этого, имеются и еще другие, более высокоэнерге­тические состояния. Когда мы в гл. 8 говорили о моле­куле бензола, мы пользова­лись только двумя состоя­ниями, а прочие забыли. И мы обнаружили, что энергия основного состояния молекулы не совпадала с энергией ни одного из нарисованных состояний; нет, она была ниже на величину, пропорциональную амплитуде переброса из одного такого состояния в другое.

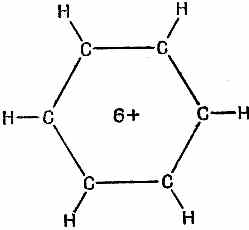
А теперь мы хотим взглянуть на ту же молекулу с совершен­но иной точки зрения, применяя приближение другого рода. Обе точки зрения приведут нас к разным ответам, но когда мы усовершенствуем оба приближения, то придем к истине — к правильному описанию бензола.

Однако если не позаботиться об этих усовершенствованиях (что обычно и делают), то не нужно удивляться, что эти описа­ния не сойдутся. Мы по крайней мере покажем, что при новой точке зрения низшая энергия молекулы бензола оказывается ниже, чем у любой из структур с тремя двойными связями (см. фиг. 13.3).



*Фиг. 13.3. Два базисных состоя­ния молекулы бензола, исполь­зовавшиеся в гл. 8.*

Рассмотрим следующую картину. Представим себе шесть ато­мов водорода, связанных только одиночными связями (фиг. 13.4).

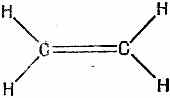


*Фиг. 13.4. Бензольное кольцо, из которого убрали шесть электронов.*

Мы убрали шесть электронов (поскольку каждая связь обоз­начает пару электронов), так что перед нами шестикратно ионизованная молекула бензола. Теперь посмотрим, что слу­чится, когда мы поодиночке вернем в молекулу всю шестерку электронов, считая, что каждый из них может свободно двигать­ся вокруг кольца. Допустим также, что все связи, показанные на фиг. 13.4, заполнены и не нуждаются в дальнейшем рассмотре­нии. Что происходит, когда мы возвращаем молекулярному иону его электрон? Он, конечно, может расположиться в любом из шести мест на кольце, соответствующих шести базисным со­стояниям. И у него будет некоторая амплитуда (скажем *А)* того, что он перейдет с одного места на другое. При анализе стационарных состояний обнаружатся несколько возможных уровней энергии. Это только при одном электроне.

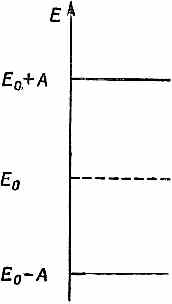
Добавим еще один электрон. И сделаем теперь самое стран­ное предположение: *то, что делает один электрон, не сказывается на том, что делает другой.* На самом деле они, конечно, будут взаимодействовать; они отталкивают друг друга с помо­щью кулоновых сил, и, кроме того, их энергия, когда они по­падают в одно место, должна заметно отличаться от удвоенной энергии, когда они туда попадают поодиночке. Конечно, приб­лижение независимых частиц незаконно, когда мест только шесть, особенно когда в них хотят поместить *шестерку* электро­нов. Но, несмотря на это, химики-органики сумели многому научиться, делая именно такое приближение.

Прежде чем подробно рассчитывать молекулу бензола, возь­мем пример попроще — молекулу этилена. В нее входят только два атома углерода и по паре атомов водорода с каждой сторо­ны (фиг. 13.5).



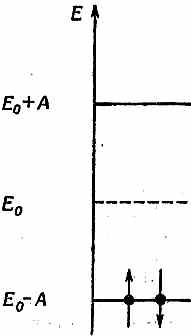
*Фиг. 13.5. Молекула этилена.*

У молекулы есть одна «лишняя» связь между двумя атомами углерода, в которую входят два электрона. Уберем один из этих электронов; что мы получим? То, что оста­нется, можно будет рассматривать как систему с двумя состоя­ниями: оставшийся электрон может находиться либо возле од­ного атома, либо возле другого. И, как у всякой системы с двумя состояниями, допустимые энергии отдельного электрона могут быть равны либо *Е*0*-А,* либо *Е*0*+А* (фиг. 13.6).



*Фиг. 13.6. Возможные уровни энергии «лиш­них» электронов в молекуле этилена.*

Добавим теперь второй электрон. Все очень хорошо: электро­нов у нас два — первый можно поставить в нижнее состояние, а второй в верхнее, не так ли? Не совсем,— мы о чем-то забыли. Ведь каждое из со­стояний на самом деле двойное. Когда мы говорим, что допустимо состояние с энер­гией *Е*0*-А,* то в действительности там их пара. В одно и тоже состояние могут по­пасть два электрона, один со спином, направленным вверх, другой — вниз (но не больше, из-за прин­ципа запрета). Так что на самом деле имеются два возможных состояния с энергией *Е*0*-А.* Можно начертить диаграмму (фиг. 13.7), которая показывает и уровни энергии, и их насе­ленность.



Фиг. 13.7. В добавочной связи молекулы этилена два электрона (один со спином вверх, другой — вниз) могут занять низший уровень энергии.

В состоянии наименьшей энергии оба электрона будут в наинизшем состоянии с противоположными спинами. Энергия «лишней» связи в молекуле этилена поэтому равна 2*(Е*0*-А),* если пренебречь взаимодействием между двумя электронами. Теперь вернемся к бензолу. У каждого из двух состояний на фиг. 13.3 есть три двойные связи. И каждая из них очень похожа на связь в этилене и дает вклад в энергию 2*(Е*0*-А),* где теперь *Е*0 *—* уже энергия, необходимая, чтобы поместить электрон в бензоле на нужное место, *а А —* амплитуда пере­броса его в соседнее место. Значит, энергия должна быть равна примерно 6*(Е*0*-А).* Но когда мы раньше изучали бензол, то пришли к выводу, что его энергия ниже энергии структуры с тремя двойными связями. Посмотрим, получится ли теперь, с нашей новой точки зрения, энергия бензола ниже, чем у трех двойных связей.

Начинаем с шестикратно ионизо­ванного бензольного кольца. Добавляем один электрон. Теперь у нас система с шестью состояниями. Мы пока еще не решали таких систем, но знаем, что нужно делать. Можно написать шесть уравнений для шести амплитуд и т. д. Но не лучше ли сберечь свои силы, ведь мы уже ре­шили эту задачу, исследуя электрон в бесконечной цепочке атомов. Конечно, бензол — не бесконечная цепочка, шесть мест для атомов в нем расположены по кругу. Но представьте, что мы разняли кольцо в цепь и пронумеровали атомы вдоль цепи числами от 1 до 6. В бесконечной линии следующее место имело бы номер 7, но если мы условимся, что оно совпадает с местом номер 1 и т. д., то все окажется в точности похожим на бензольное кольцо. Иными словами, мы можем взять реше­ние для бесконечной линии с *добавочным требованием,* чтобы решение было периодичным с периодом длиной в шесть атомов. Согласно гл. 11, электрон на прямой обладает состояниями определенной энергии, когда амплитуда того, что он окажется в некотором месте *хn,* равна *.* При каждом *k* энер­гия равна

*E=E*0*-*2*Acoskb.* (13.25)

Теперь из этих решений нам нужно оставить только такие, которые через каждые 6 атомов повторяются. Разберем сперва общий случай, когда в кольце *N* атомов. Если решение должно иметь период в *N* атомных расстояний, то *eikbN* должна быть равна единице, или *kbN* должна быть кратна 2π. Если s — любое це­лое число, то наше условие имеет вид

*kbN=2πs.* (13.26)

Мы раньше видели, что нет смысла брать *k* вне пределов ±π/*b*. Это означает, что мы получим все мыслимые состояния, беря значения s в пределах *±N*/2.

Стало быть, мы приходим к тому, что у *N*-атомного кольца имеется *N* состояний [определенной энергии](#прим3) и их волновые числа *ks* даются числами

*ks*=2πs/*Nb*. (13.27)

Каждое состояние имеет энергию (13.25). Получается линейча­тый спектр возможных уровней энергий. Спектр для бензола (*N*=6) показан на фиг. 13.8, *б.* (Числа в скобках указывают число *различных* состояний с одинаковой энергией.)

Есть наглядный способ изобразить эти шесть уровней энер­гии. Он показан на фиг. 13.8, а. Вообразим круг с центром на одном уровне с *Е*0и с радиусом *2А.* Если мы отложим, начиная снизу, шесть равных дуг (под углами, считая от нижней точки, *ksb* = *2πs/N,* или 2πs/6 для бензола), то высоты точек круга будут решениями (13.25). Шесть точек представляют шесть возможных состояний. Низший уровень энергии придется на *Е*0*-2А*;дальше идут два состояния с одинаковой энергией *Е*0*-А* [и т. д.](#прим4) Это возможные состояния одного электрона. Если электронов не один, а больше, то в каждое состояние может попасть по два электрона с противоположными спинами.

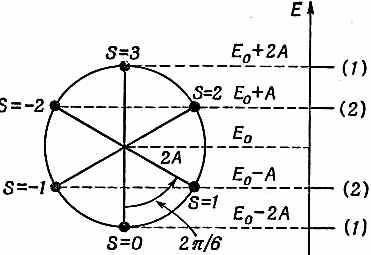
У молекулы бензола надо здесь разместить шесть электро­нов. Если состояние основное, то они должны попасть в наи­низшие возможные энергетические состояния — пара в s=0, пара в s=+1 и пара в s =-1. Согласно приближению неза­висимых частиц, энергия основного состояния равна

C:\Мои документы\gray.jpg

Она действительно оказывается меньше, чем у трех отдельных двойных связей,— на *2А.*

Сравнив энергию бензола с энергией этилена, можно опреде­лить *А.* Эта величина оказывается равной 0,8 *эв,* или в едини­цах, которые нравятся химикам, 18 *ккал/моль.*

Этим описанием можно воспользоваться, чтобы вычислить или понять другие свойства бензола. Например, глядя на фиг. 13.8, можно разобраться в возбуждении бензола светом.



Фиг. 13.8. Уровни энергии в кольце, в котором для электрона приготовлены шесть свободных мест (на­пример, в бензольном).

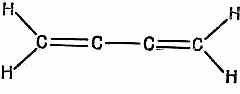
Что бы произошло, если бы мы попытались возбудить один из электронов? Он мог бы передвинуться к одному из незанятых высших состояний. Наинизшей энергией возбуждения оказался бы переход от наивысшего заполненного уровня к наинизшему пустому. Эта энергия равна 2*A*. Бензол будет поглощать свет с частотой *v*=2*A/h.* Кроме того, будет наблюдаться также по­глощение фотонов с энергиями *ЗА* и 4*A*. Нечего и говорить, что спектр поглощения бензола был измерен, и картина спектраль­ных линий оказалась более или менее правильной, если не счи­тать того, что наинизшие переходы наблюдаются в ультрафио­лете; и чтобы удовлетворить всем данным, пришлось бы взять величину *А* около 1,4—2,4 *эв.* Иначе говоря, численное значе­ние *А* вдвое-втрое выше, чем предсказывается энергией хими­ческой связи.

Как же поступает химик в таких случаях? Он анализирует множество молекул сходного типа и выводит какие-то эмпири­ческие правила. Он учит, например: для расчета энергии связи берите вот такое-то и такое-то значение *А,* а для получения при­ближенно верного спектра поглощения возьмите другое значе­ние *A*. Вам может показаться, что это звучит слегка абсурдно. И впрямь, в ушах физика, который пытается объяснить всю при­роду из первоначальных принципов, это звучит довольно дико. Но перед химиком задача другая. Он обязан заранее догадаться, что произойдет с молекулами, которых до сих пор не было или которые до конца не поняты. Ему нужен ряд эмпирических пра­вил и ему совершенно все равно, откуда они возьмутся. Так что теорией он пользуется совсем не так, как физик. Он берет урав­нения, в которых отразился свет истины, а потом вынужден менять в них константы, делая эмпирические поправки.

В случае бензола основная причина несогласия лежит в нашем предположении, что электроны независимы; теория, из которой мы исходили, на самом деле незаконна. Тем не менее на нее падает какой-то отблеск истины, потому что результаты, по-видимому, идут в правильном направлении. При помощи таких уравнений плюс некоторые эмпирические правила (со множеством исключений) химик-органик прокладывает свой путь через чащу тех сложнейших вещей, которые он решился изучать. (Не забывайте, что в действительности причина, по которой физику удается выводить что-то из основных принципов, состоит в том, что он выбирает только простые задачи. Он ни­когда не решает задач с 42 или даже с 6 электронами. До сих пор он смог рассчитать с приличной точностью только атом водо­рода да атом гелия.)

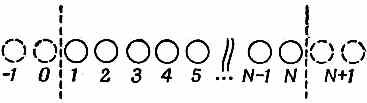
**§ 5. Еще немного органической** **химии**

Можно ли применить все эти идеи для изучения других молекул? Рассмотрим такую молекулу, как бутадиен (1,3); она показана на фиг. 13.9 с помощью обычной картины валентных связей.



*Фиг. 13.9. Изображение с по­мощью валентных связей молекулы бутадиена (1,3).*

Мы можем опять затеять те же игры с лишней четверкой электронов, отвечающей двум двойным связям. Если ее убрать, то остается четыре атома углерода по одной линии. А как рас­считывать такую линию, вы уже знаете. «Но позвольте,— скажете вы,—я ведь только знаю, как решать *бесконечную* ли­нию». Однако решения для бесконечной линии включают также и решения для конечной. Следите. Пусть *N —* число атомов на прямой; пронумеруем их 1, 2, ..., *N* (фиг. 13.10).



Фиг. 13.10. Отрезок прямой с N молекулами.

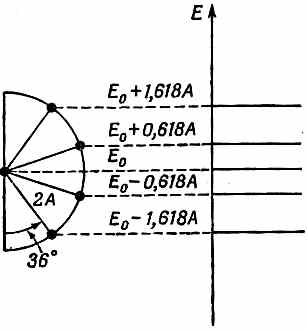
В уравне­нии для амплитуды в точке 1 у вас не появится член для пере­хода из точки 0. Точно так же уравнение для точки *N* будет отличаться от того, которым мы пользовались для бесконечной прямой, потому что никакого вклада точки *N*+1 не будет. Но представьте, что мы придумали решение для бесконечной прямой со следующим свойством: амплитуда оказаться вблизи атома 0 есть нуль и амплитуда оказаться вблизи атома *N*+1 тоже нуль. Тогда система уравнений для всех точек от 1 до *N* на конечной линии также будет удовлетворяться. Казалось бы, таких решений не бывает, ибо все наши решения имеют вид C:\Мои документы\gray.jpgи обладают всюду одинаковой абсолютной величиной. Но вспомните, что энергия зависит только от абсолютной вели­чины *k,* так что другим в равной мере законным решением было быC:\Мои документы\gray.jpg*.* И то же справедливо для любой суперпозиции этих двух решений. Вычитая их, мы получим решение sin *kxn,* а оно удовлетворяет требованию, чтобы амплитуда при *х=*0 была нулем. И оно все еще соответствует энергии *Е*0*-2А*cos*kb.* Далее, подходящим выбором величины *k* можно также добиться, чтобы амплитуда в *xN+*1была тоже нулем. Для этого нужно, чтобы *(N*+1*)kb* было кратным π, т. е. чтобы

C:\Мои документы\gray.jpg

где *s* — целое число между 1 и *N.* (Берутся только положительные *k,* потому что каждое решение содержит и +*k,* и -*k;* перемена знака *k* опять дает то же состояние.) Для молекулы бутадиена *N*=4, так что имеется четверка состояний с

C:\Мои документы\gray.jpg

Уровни энергии можно теперь представить, пользуясь кру­говой диаграммой, похожей на бензольную. На сей раз возьмем полукруг, деленный на пять равных частей (фиг. 13.11).



*Фиг. 13.11. Энергетические уровни бутадиена.*

Точка внизу отвечает s=0, что не дает какого-либо состояния. То же самое справедливо для точки наверху, отвечающей s=*N*+1. Оставшиеся четыре точки дают четверку разрешенных энергий. Имеется четыре стационарных состояния, чего и следовало ожидать, судя по четырем базисным состояниям. В круговой диаграмме углы равны π/5, или 36°. Наинизшая энергия оказы­вается равной *Е*0 *—* 1,618*A*. (Каких только чудес не бывает в математике! [Золотое сечение](#прим5) греков дает нам наинизшее энер­гетическое состояние молекулы бутадиена, как это следует из

нашей теории!)

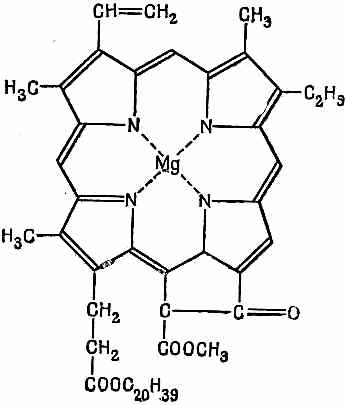
Теперь уже ясно, как меняется энергия молекулы бутадиена, когда в нее вводят четверку электронов. Эта четверка заполнит два нижних уровня — каждый будет заполнен парой электро­нов с противоположными спинами. Полная энергия будет равна

*C:\Мои документы\gray.jpg*

Это выглядит вполне разумно. Энергия чуть пониже, чем просто у двух двойных связей, но связь не так сильна, как в бензоле. Во всяком случае, именно так химик анализирует некоторые ор­ганические молекулы.

Но в его распоряжении есть не только энергии, но и ампли­туды вероятности. Зная амплитуды для каждого состояния и зная, какие состояния заполнены, он может сообщить нам, какова вероятность нахождения электрона в каком-нибудь месте молекулы. Те места, где пребывание электрона более вероятно, вступают в игру при таких химических замеще­ниях, которые требуют, чтобы электрон обслуживал и другую группу атомов. Другие же места молекулы участвуют в таких замещениях, при которых молекула имеет тенденцию передать системе еще один электрон.

Подобные же идеи могут помочь нам получить правильное представление даже о таких сложных молекулах, как хлоро­филл, один из вариантов которого показан на фиг. 13.12.

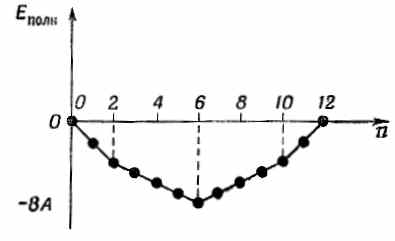


*Фиг. 13.12. Молекула хлоро­филла.*

Обра­тите внимание, что двойные и одиночные связи образуют длинное замкнутое кольцо с двадцатью интервалами.

Лишние электроны двойных связей могут бегать по этому кольцу. При помощи метода независимых частиц можно получить всю совокупность энергетических уровней. От пе­реходов между этими уровнями возникают сильные линии поглощения, которые лежат в видимой части спектра и при­дают этой молекуле ее густой цвет. И другие сложные мо­лекулы, такие, как ксантофилл, от которого листья по­лучают красную окраску, можно изучить таким же точно способом.

В органической химии при работе с подобного рода теорией использу­ют еще одну идею. Она, пожалуй, самая удачная из всех (или по крайней мере в определенном смы­сле самая точная). Она отвечает на такой вопрос: в каких случаях получается особенно прочная химическая связь? Ответ очень интере­сен. Возьмем вначале для примера бензол и представим ряд со­бытий, которые произойдут, если мы начнем с шестикратно иони­зованной молекулы и примемся добавлять новые и новые электроны. Тогда нужно будет говорить о различных ионах бензола — отрицательных и положительных. Изобразим энер­гию иона (или нейтральной молекулы) как функцию числа элек­тронов. Если мы примем *Е*0=0 (мы не знаем, чему равно *E*0), то получим кривую, показанную на фиг. 13.13.

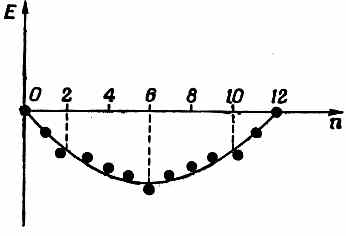


*Фиг. 18.13. Сумма всех энергий электронов, ког­да нижние состояния на фиг. 13.8 заполнены n электронами (принято E*0=0).

Для первых двух электронов наклон функции постоянен — это прямая линия. Затем для каждой очередной группы электронов он воз­растает, меняясь скачком от одной группы к другой. Наклон изменяется тогда, когда заканчивается заполнение системы уровней с одной энергией и очередному электрону приходится переходить к очередной более высокой системе уровней.

В действительности истинная энергия иона бензола совер­шенно непохожа на фиг. 13.13 из-за взаимодействий электронов и из-за электростатических энергий, которыми мы пренебрегли. Эти поправки, однако, меняются с *n* довольно плавно. Даже если бы их все учесть, на окончательной энергетической кривой все равно остались бы изломы при таких и, при которых как раз заполняются отдельные уровни энергии.

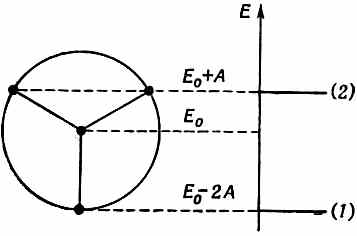
Рассмотрим теперь очень гладкую кривую, на которой в среднем укладываются все точки (фиг. 13.14).



*Фиг. 13.14. Точки с фиг. 13.13 и плавная кривая. Молекулы с n*=2, 6, 10 устойчивее *остальных.*

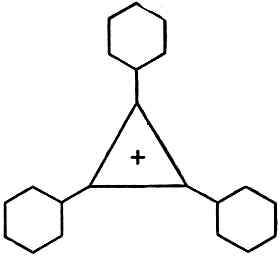
Можно сказать, что точки *над* этой кривой обладают энергией «выше чем нор­мальной», а точки *под* нею «ниже чем нормальной». И в общем случае следует ожидать, что у конфигураций с «ниже чем нор­мальной» энергией средняя устойчивость окажется повышенной. Обратите внимание, что конфигурации, которые значительно ниже кривой, всегда оказываются в конце одного из прямоли­нейных отрезков, а именно там, где электронов как раз хватает на то, чтобы заполнить «энергетическую оболочку», как ее на­зывают. Это очень точное предсказание теории. *Молекулы и ионы особо устойчивы (по сравнению с прочими подобными кон­фигурациями), когда имеющиеся у них в наличии электроны как раз заполняют энергетическую оболочку.*

Эта теория объяснила и предсказала некоторые весьма нео­бычные химические факты. Вот очень простой пример. Возьмем кольцо из трех атомов. Почти невозможно поверить, что химик сможет из трех атомов составить кольцо и сделать его устой­чивым. Но это было сделано. Энергетический круг для трех электронов показан на фиг. 13.15.



*Фиг. 13.15. Энергетиче­ская диаграмма для кольца из трех атомов.*

Если поместить в нижнее состояние два электрона, то пойдут в дело только два из трех требуемых электронов. Третий электрон придется поместить на более высокий уровень. Отсюда следует, что молекула не будет слишком устойчивой. Зато двухэлектронная структура обязана быть устойчивой. И действительно, оказывается, что нейтраль­ную молекулу трифенилциклопропанила сделать очень трудно, но зато сравнительно легко соорудить положительный ион, по­казанный на фиг. 13.16.



*Фиг. 13.16. Катион трифенилииклопропанила.*

Правда, кольцо из трех атомов никогда не бывает легко сделать, потому что, когда связи в органической молекуле образуют равносторонний треугольник, всегда появ­ляются большие напряжения. Чтобы соединение было устой­чиво, структуру нужно как-то стабилизировать. Оказывается, что, если поставить по углам три бензольных кольца, можно сделать положительный ион. (Отчего нужно добавлять бензоль­ные кольца, непонятно.)

Подобным же образом можно также проанализировать и пятиугольное кольцо. Если вы начертите энергетическую диа­грамму, то качественно сможете убедиться, что шестиэлектронная структура должна быть особо устойчива, так что такая мо­лекула должна быть устойчивее всего в виде отрицательного иона. И вот кольцо из пяти атомов действительно хорошо из­вестно, легко сооружается и действует всегда как отрицательный ион. Подобным же образом вы легко убедитесь, что кольцо из 4 и 8 атомов не очень интересно, а кольцо из 14 или 10 (как и кольцо из 6) должно быть особенно устойчиво в форме нейт­рального объекта.

**§ 6. Другие применения приближения**

Есть два других сходных случая, на которых мы остано­вимся лишь вкратце. Говоря о строении атома, можно считать, что электрон заполняет последовательные оболочки. Теорию движения электрона Шредингера удается с легкостью разра­ботать лишь для *отдельного* электрона, движущегося в «цент­ральном» поле — поле, зависящем только от расстояния от точки. Но как же тогда разобраться в том, что происходит в атоме, в котором 22 электрона?! Один из путей — воспользо­ваться приближением независимых частиц. Сперва вы подсчиты­ваете, что происходит с одним электроном. Получаете сколько-то там уровней энергии. Помещаете электрон в нижнее энерге­тическое состояние. В грубой модели вы продолжаете игнори­ровать взаимодействия электронов и продолжаете заполнять последовательные оболочки, но еще лучшие ответы получатся, если учесть (хотя бы приближенно) влияние электрического заряда электрона. Добавляя электрон, каждый раз вычис­ляйте амплитуду того, что он будет обнаружен в различных местах, и затем с ее помощью прикидывайте вид сферически симметричного распределения заряда. Поле этого распределе­ния (совместно с полем положительного ядра и всех предыдущих электронов) используйте для расчета состояний, доступ­ных очередному электрону. Таким путем вы можете получить вполне разумные оценки энергий нейтрального атома и раз­личных ионизованных состояний. Вы увидите, что и здесь имеются энергетические оболочки, так же как у электронов в кольцевой молекуле. При не совсем заполненной оболочке атом иногда охотнее присоединяет к себе один или несколько элект­ронов, а иногда охотнее их теряет, чтобы прийти в устойчивое состояние, когда оболочка заполнена.

Эта теория объясняет механизм, лежащий в основе самых фундаментальных химических свойств, проявляющихся в пе­риодической таблице элементов. Инертные газы — это те эле­менты, у которых как раз закончилось заполнение оболочки, и их особенно трудно заставить вступать в реакцию. (В действи­тельности, конечно, некоторые из них реагируют, например, с фтором или с кислородом, но в таких соединениях связь очень слаба; так называемые инертные газы инертны лишь отчасти.) Атом, у которого на один электрон больше или на один меньше, чем у инертного газа, легко теряет или присоединяет этот элект­рон, чтобы оказаться в особо устойчивых (низкоэнергетических) условиях, какие возникают от того, что оболочка заполнена до конца,— они являются очень активными химическими элемен­тами с валентностью +1 и -1.

В ядерной физике можно встретиться с другим подобным случаем. В атомном ядре протоны и нейтроны очень сильно взаимодействуют друг с другом. Но и при этом модель незави­симых частиц опять полезна для анализа структуры ядра. Сперва было открыто экспериментально, что ядра особо устой­чивы, если в них содержится определенное число нейтронов — а именно 2, 8, 20, 28, 50, 82. Ядра, содержащие в таком же коли­честве протоны, тоже особенно устойчивы. Поскольку вначале объяснения этим числам не было, их назвали «магическими числами» ядерной физики. Хорошо известно, что нейтроны и протоны друг с другом сильно взаимодействуют; поэтому люди были чрезвычайно поражены, когда выяснилось, что модель независимых частиц предсказывает оболочечное строение ядра, причем сами собой возникают несколько первых магических чисел. Модель эта предполагала, что каждый нуклон (протон или нейтрон) движется в центральном потенциальном поле, создаваемом средним влиянием всех прочих нуклонов. Однако модели не удавалось верно предсказать другие магические чис­ла. Но затем Мария Майер и независимо Йенсен с сотрудника­ми открыли, что, принимая модель независимых частиц и до­бавляя только поправку на так называемое «спин-орбитальное взаимодействие», можно в этой усовершенствованной модели получить все магические числа. (Спин-орбитальное взаимодей­ствие приводит к тому, что энергия нуклона оказывается ниже, если его спин направлен туда же, куда направлен его орбиталь­ный момент количества движения в ядре.) Теория дает даже больше — ее картина так называемой «оболочечной структуры» ядра позволяет предсказывать некоторые характеристики ядер и ядерных реакций.

Приближение независимых частиц оказалось полезным для широкого круга явлений — от физики твердого тела до химии, от биологии до ядерной физики. Такое приближение часто очень грубо, но оно в состоянии помочь нам понять, отчего бывают особо устойчивые условия — отчего возникают оболочки. Но поскольку оно опускает всю сложность взаимодействий между индивидуальными частицами, нас не должно удивлять, что часто ему не удается правильно предсказать многие важные детали.

\* Отношение сторон прямоугольника, который можно разбить на квадрат и на подобный ему прямоугольник.

***\* Когда имеется пара состояний (с разными распределениями ам­плитуд) с той же энергией, мы говорим, что эта пара состояний «вырож­дена». Заметьте, что энергией E0-А могут обладать четыре электрона.***

***\* Могло бы показаться, что при четном N есть N+1 состояний. Это не так, ибо s = ±.N/2 дают одно и то же состояние.***

***\* Квазичастицы обсуждаемого типа могут действовать и как бозе-и как ферми-частицы; и, как и у свободных частиц, частицы с целым спином суть бозоны, с полуцелым—фермионы. «Магнон» символизирует, что электрон со спином, направленным вверх, перевертывается вниз. Спин меняется на единицу. Значит, у магнона спин целый и он — бозон.***

***\* Основное состояние здесь на самом деле «вырождено». Существуют и другие состояния с той же энергией, например, когда все спины смотрят вниз или в любую другую сторону. Но наложение самого слабого внешнего поля в направлении z снабдит все эти состояния различной энергией, и истинным основным состоянием окажется как раз то, которое мы выбрали.***

***Главa 14***

**ЗАВИСИМОСТЬ АМПЛИТУД ОТ МЕСТА**

[**§ 1. Как меняются амплитуды в****доль прямой**](#a1)

[**§ 2. Волновая фу****нкция**](#a2)

[**§ 3. Состояния с** **определенным импульсом**](#a3)

[**§ 4. Нормировка с****остояний с определенной координатой х**](#a4)

[**§ 5. Уравнение Шр****едингера**](#a5)

[**§ 6. Квантованны****е уровни энергии**](#a6)

**§ 1. Как меняются амплитуды вдоль прямой**

Выясним теперь, как в квантовой механике амплитуды вероятности меняются в простран­стве. В некоторых предыдущих главах у вас могло возникнуть смутное чувство, что кое о чем мы умалчиваем. Например, когда мы тол­ковали о молекуле аммиака, мы решили описы­вать ее через два базисных состояния. За одно из них мы выбрали случай, когда атом азота находится «выше» плоскости трех атомов во­дорода, а в качестве другого базисного состояния выбрали такие условия, когда атом азота стоит «ниже» плоскости трех атомов водорода. Почему же мы выбрали именно эту пару состоя­ний? Почему бы не считать, что атом азота мо­жет оказаться либо на расстоянии 2Å от плос­кости трех атомов водорода, либо на расстоянии 3Å, а может, и 4Å. Ведь атом азота может зани­мать множество положений. Или, когда шла речь о молекулярном ионе водорода, в котором имеется электрон, распределенный между двумя протонами, мы тоже вообразили два базисных состояния. Одно — когда электрон находится по соседству с протоном № 1, и другое, когда он пребывает в окрестностях протона № 2. Ясно, что многие детали мы упустили. Электрон ведь находится не точно у самого протона № 2, а только в его окрестностях. Он может оказаться и где-то повыше протона, и где-то пониже, и где-то слева, и где-то справа.

Мы намеренно избегали уточнения таких деталей. Мы говорили, что нас интересуют только определенные стороны проблемы, и вооб­ражали, что если уж электрон находится по­близости от протона № 1, то он принимает некоторое довольно определенное положение.

На самом деле в этих условиях вероятность обнаружить элект­рон обладает каким-то определенным распределением в про­странстве вблизи протона. Но нас такие детали не заботили. Можно представить дело и иначе. Когда мы рассматривали молекулярный ион водорода, то избрали приближенный под­ход, описывая положение вещей на языке двух базисных со­стояний. В действительности же таких состояний уйма. Электрон может попасть вблизи протона в свое наинизшее, или основное, состояние, но имеется еще и множество возбужденных состояний. В каждом из них электрон как-то по-особому распре­делен вблизи протона. Эти возбужденные состояния мы игно­рировали, говоря, что нас интересуют лишь условия при наи­низшей энергии. Но как раз они-то, эти возбужденные состоя­ния, и приводят к тому, что возможны различные распределе­ния электрона вокруг протона. Если мы хотим детально описать молекулярный ион водорода, то следует принять во внимание и эти прочие допустимые базисные состояния. Это можно сделать многими способами, и один из них — детальнее рассмотреть состояния, когда расположение электрона в пространстве опи­сывается более тщательно.

Мы уже достаточно подготовлены, чтобы заняться более трудоемкой процедурой, которая позволит нам обстоятельнее го­ворить о местоположении электрона, задавая амплитуду вероят­ности того, что он будет обнаружен в каком угодно месте в данной ситуации. Эта более полная теория позволит подкре­пить те приближения, которыми мы раньше пользовались. Наши прежние уравнения в каком-то смысле смогут быть вы­ведены как своего рода приближения к более полной теории. Вас может удивить, почему мы не начали прямо с более полной теории и не делали приближений по мере движения вперед. Но мы считали, что, отправившись от приближения двух состояний и постепенно подходя к более полной теории, вам будет легче достичь понимания всей механики квантовой ме­ханики. Наш подход, по-видимому, противоположен тому, ко­торый вы найдете во многих книгах.

Когда мы обратимся к теме этой главы, вы заметите, что мы нарушаем правило, которому в прошлом неизменно следовали. Какой бы темы мы ни касались, мы всегда пытались более или менее полно представить вам физику дела, указывая как можно полнее, куда ведут эти идеи. Мы стремились наряду с описанием общих следствий теории представить и некоторые характерные детали, чтобы вам было ясно, куда ведет эта теория. А теперь нам придется нарушить это правило. Мы расскажем об ампли­тудах вероятности пребывания электрона где-то в пространстве и продемонстрируем вам дифференциальные уравнения, которым они удовлетворяют. Но у нас не будет времени углубиться и обсудить многие очевидные выводы, следующие из теории.

Более того, нам даже не удастся связать эту теорию с некоторы­ми приближенными формулировками, к которым мы раньше прибегали, скажем, когда изучали молекулу водорода или молекулу аммиака. На этот раз придется бросить дело на пол­пути, не окончив его. Курс наш близится к концу, и хочешь не хочешь, придется обойтись одним только введением в общие представления. Мы укажем связь с тем, о чем говорилось рань­ше, и, кроме того, некоторые другие подходы к задачам кванто­вой механики. Надеемся, что этих представлений вам хватит, чтобы потом двинуться самостоятельно и уже по книгам узнать многие выводы из приведенных здесь уравнений. Все-таки нужно оставить кое-что и на будущее.

Вспомним еще раз, что нам известно о том, как электрон может продвигаться вдоль линии атомов. Когда электрон может с какой-то амплитудой перепрыгивать от одного атома к сосед­нему, то имеются состояния определенной энергии, в которых амплитуда вероятности обнаружить электрон распределяется вдоль решетки в виде бегущей волны. Для длинных волн (малых значений волнового числа *К)* энергия состояния пропорциональ­на квадрату волнового числа. Для кристаллической решетки с постоянной *b,* в которой амплитуда того, что электрон в еди­ницу времени перепрыгнет от одного атома к следующему, равна *iA/h,* энергия состояния связана с *k* (при малых *kb)* фор­мулой

*E=Ak2b2* (14.1)

(см. гл. 11, § 1). Мы видели также, что группы таких волн с близкими энергиями образуют волновой пакет, который ведет себя как классическая частица с массой mэфф:

C:\Мои документы\gray.jpg

Раз волны амплитуды вероятности в кристалле ведут себя как частицы, то естественно ожидать, что общее квантовомеханическое описание частицы выявит такое же волновое поведение, какое мы наблюдали в решетке. Предположим, мы взяли одно­мерную решетку и вообразили, что постоянная решетки *b* стано­вится все меньше и меньше. В пределе получилось бы, что элект­рон может оказаться в любой точке линии. Нам пришлось бы перейти к непрерывному распределению амплитуд вероятности. У электрона появилась бы амплитуда оказаться в любом месте линии. Таков был бы один из путей описания движения электро­нов в вакууме. Иными словами, если мы вообразим, что все пространство можно пронумеровать бесконечным числом очень тесно расположенных точек, и сможем вывести уравнения, связывающие между собой амплитуды в одной точке с амплитудами в соседних, то получим квантовомеханические законы движения электрона в пространстве.

Начнем с того, что напомним некоторые общие принципы квантовой механики. Пусть имеется частица, которая может в квантовомеханической системе существовать в разных усло­виях. Любые заданные условия, в которых может быть обна­ружен электрон, мы называем «состоянием» и отмечаем их при помощи вектора состояния, скажем |ϕ>. В каких-то других условиях и метка будет другая, скажем вектор состояния |ψ>. Затем мы вводим идею о базисных состояниях. Мы говорим, что имеется совокупность состояний | 1 >, | 2>, | 3>, | 4> и т. д., обладающая следующими свойствами. Во-первых, все эти со­стояния совершенно различны — мы говорим, что они ортого­нальны. Под этим мы понимаем, что для любой пары базисных состояний | *i*> и |*j*> равна нулю амплитуда <*i*|*j*> того, что электрон, будучи в состоянии | *j*>, окажется также и в состоя­нии <*i*| , если только, конечно, |*i*> и |*j*> не обозначают одного и того же состояния. Все это символически представляется

так:

<*i*|*j*>=δ*ij*(14.3)

Вспомните, что δij=0, если *i* и *j* различны, и δ*ij*=1, если *i* и *j* одинаковые числа.

Далее, базисные состояния |*i*>обязаны быть полной сово­купностью, так чтобы любое состояние могло быть выражено на их языке. Иначе говоря, любое состояние |ϕ> может быть полностью описано заданием всех амплитуд <*i*|ϕ> того, что частица в состоянии |ϕ> обнаружится также в состоянии |*i*>*.* Вектор состояния |ϕ> представляется суммой базисных со­стояний, умноженных каждое на коэффициент, являющийся амплитудой того, что состояние |ϕ> находится также в состоя­нии |*i*>:

C:\Мои документы\gray.jpg

Наконец, если рассмотреть любые два состояния |ϕ> и |ψ>, то амплитуду того, что состояние |ψ>окажется также в состоянии |ϕ>, можно найти, проецируя сперва состояние |ψ> на базисные состояния, а затем каждое из базисных со­стояний — на состояние |ϕ>. Это записывается так:

C:\Мои документы\gray.jpg

Суммирование, конечно, проводится по всей совокупности ба­зисных состояний | *i*>*.*

В гл. 11,когда мы рассчитывали, что бывает с электроном, помещенным в линейную цепочку атомов, вы выбрали совокуп­ность базисных состояний, в которых электрон был расположен близ того или иного из атомов цепочки. Базисное состояние |*n*> представляло электрон, локализованный (расположенный) возле атома номер *п.* (Конечно, неважно, обозначать ли наши базисные состояния |*n*> или |*i*>.) Чуть позже мы нашли, что базисные состояния удобнее метить координатой атома, а не номером атома в цепочке. Состояние | *хn*> — это просто другой способ записи состояния |*n*>. Тогда, следуя общему правилу, любое состояние |ψ> можно описать заданием того, что электрон в состоянии |ψ> находится также в одном из состояний |*хn*>*.* Для удобства мы решили обозначать эти амплитуды символом

*Cn=*<*xn*|ψ>. (14.6)

Поскольку базисные состояния связаны с местоположением электрона на линии, то амплитуду *Сn* можно рассматривать как функцию координаты *х* и писать ее в виде *С*(*хn*)*.* Амплитуды *С*(*хn*)будут в общем случае меняться во времени и поэтому суть также функции от *t,* но мы не будем отмечать эту зависи­мость явно.

Кроме того, в гл. 11 мы предположили, что амплитуды *С(хn)* обязаны меняться во времени так, как положено по гамильтонову уравнению (11.3). В нашем новом обозначении это уравне­ние имеет вид

C:\Мои документы\gray.jpg

Два последних слагаемых в правой части представляют такой процесс, когда электрон, находившийся возле атома *(n*+1) или возле атома *(n-*1), окажется возле атома (*n*).

Мы нашли, что (14.7) имеет решения, отвечающие состоя­ниям определенной энергии. Мы записывали их в виде

C:\Мои документы\gray.jpg

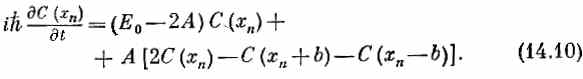
У состояний с низкой энергией длины волн велики *(k* мало) и энергия связана с *k* формулой

C:\Мои документы\gray.jpg

или, если выбрать нуль энергии так, чтобы было *(Е0-*2*А)=*0, то энергия дается формулой (14.1).

Посмотрим, что бы произошло, если бы мы позволили рас­стоянию *b* между атомами решетки стремиться к нулю, сохра­няя волновое число постоянным. Если бы больше ничего не случилось, то последнее слагаемое в (14.9) обратилось бы просто в нуль, и никакой физики бы не осталось. Но предположим, что *А* и *b* вместе изменяются так, что при стремлении *b* к нулю произведение *Ab2* поддерживается [постоянным](#прим1): с помощью (14.2) мы запишем *Аb2* в виде постоянной h2*/2mэфф.* При этом (14.9) не изменится, но что произойдет с дифференциальным уравнением (14.7)?

Перепишем сперва (14.7) так:



При нашем выборе *Е*0первое слагаемое выпадет. Далее, пред­ставим себе непрерывную функцию *С*(*х*)*,* которая плавно про­ходит через значения *С*(*хn*)в точках *хn.* Когда расстояние *b* стремится к нулю, точки *хn* сближаются все теснее и теснее и [если *С*(*х*)меняется достаточно плавно] величина в скобках попросту пропорциональна второй производной *С*(*х*)*.* Можно написать (в чем легко убедиться, разложив в ряд Тэйлора каждый член) равенство

C:\Мои документы\gray.jpg

Тогда в пределе, когда *b* стремится к нулю, а *b2A* поддерживает­ся равным h2*/2mэфф,* уравнение (14.7) переходит в

C:\Мои документы\gray.jpg

Перед нами уравнение, утверждающее, что скорость изменения *С*(*х*) *—* амплитуды того, что электрон будет обнаружен в *х—* зависит от амплитуды того, что электрон будет обнаружен в близлежащих точках так, что эта скорость пропорциональна второй производной амплитуды по координате.

Правильное квантовомеханическое уравнение движения электрона в пустом пространстве впервые было открыто Шре­дингером. При движении по прямой оно имеет вид (14.12); надо только *m*эфф заменить на *m —* массу электрона в пустом про­странстве. При движении по прямой в пустом пространстве уравнение Шредингера имеет вид

C:\Мои документы\gray.jpg

Мы не хотим, чтобы вы считали, будто мы сейчас вывели уравнение Шредингера; мы только показываем вам один из способов, каким его можно осмыслить. Когда Шредингер впер­вые написал его, он привел какой-то вывод, опиравшийся на эвристические доводы и блестящие интуитивные догадки. Не­которые из его доводов были даже неверны, но это не имело значения; важно то, что окончательное уравнение дает правиль­ное описание природы. И цель нашего обсуждения состоит просто в том, чтобы показать вам, что правильное фундаментальное квантовомеханическое уравнение (14.13) имеет ту же самую форму, какая получается в предельном случае электрона, дви­жущегося вдоль цепочки атомов. Это значит, что можно считать, что дифференциальное уравнение (14.13) описывает диффузию амплитуды вероятности от точки к точке вдоль прямой. Иначе говоря, если электрон имеет некоторую амплитуду того, что он будет в одной точке, то чуть позже у него появится амплитуда того, что он будет в близлежащих точках. Уравнение дейст­вительно напоминает уравнения диффузии, которыми мы поль­зовались в начале курса. Но есть и одно важное отличие: мни­мый коэффициент перед производной по времени приводит к по­ведению, в корне отличному от обычной диффузии (например, от диффузии газа, распространяющегося по длинной трубе). Обычная диффузия приводит к действительным экспоненциаль­ным решениям, а решения (14.13) суть комплексные волны.

**§ 2. Волновая функция**

Чтобы получить некоторое представление о том, как теперь все будет выглядеть, вернемся к самому началу и изучим проб­лему описания движения электрона по прямой, не рассматривая состояний, связанных с атомами решетки. Мы хотим возвратить­ся к самому началу и посмотреть, какими представлениями нужно пользоваться, чтобы описать движение свободной части­цы в пространстве. Раз нас интересует поведение частицы вдоль континуума точек, то придется иметь дело с бесконечным мно­жеством возможных состояний и, как вы увидите, идеи, которые были развиты для конечного числа состояний, потребуют неко­торых технических видоизменений.

Начнем с того, что вектором состояния |*х*>обозначим со­стояние, в котором частица расположена в точности в точке с координатой *х.* Для каждого значения *х* вдоль прямой — для 1,73, для 9,67, для 10,00 и т. д.— имеется соответствующее состояние. Выберем эти состояния |*х*>в качестве базисных. Если это сделать для всех точек *х* прямой, то получится полная совокупность состояний для движения в одном измерении. Теперь положим, что имеется состояние другого рода, скажем |ψ>, в котором электрон как-то распределен вдоль прямой. Один из способов описать это состояние — задать все амплиту­ды того, что электрон будет также найден в каждом из базисных состояний |*x*>. Надо задать бесконечную совокупность ампли­туд, по одной для каждого *х.* Запишем их в виде <*x*|ψ>. Каж­дая из этих амплитуд — комплексное число, и поскольку для каждого значения *х* существует одно такое число, амплитуда <*x*|ψ> является в действительности просто функцией *х.* Запи­шем ее также в виде *С (х):*

C:\Мои документы\gray.jpg

Мы уже рассматривали такие амплитуды, которые непрерыв­ным образом меняются с координатами, говоря в гл. 5 (вып. 8) об изменениях амплитуд во времени. Мы, например, показали там, что следует ожидать, что частица с определенным импуль­сом будет обладать особым типом изменения своей амплитуды во времени. Если частица имеет определенный импульс *р* и соответствующую ему определенную энергию *Е,* то амплитуда того, что она будет обнаружена в любом заданном месте *x*, такова:

<*x*|ψ> = С (*x*) ~e*+ipx/h*. (14.15)

Это уравнение выражает важный общий принцип квантовой механики, который связывает базисные состояния, соответст­вующие различным положениям в пространстве, с другой системой базисных состояний — со всеми состояниями опреде­ленного импульса. В некоторых задачах состояния определен­ного импульса удобнее, чем состояния с определенным *х.* И лю­бая другая система базисных состояний также годится для опи­сания квантовомеханической ситуации. К связи между ними мы еще вернемся. А сейчас мы по-прежнему будем придерживаться описания на языке состояний |*х*>*.*

Прежде чем продолжать, прибегнем к небольшой замене обозначений, которая, надеемся, вас не слишком смутит. Форма функции *С (х),* определенной уравнением (14.14), естественно, будет зависеть от рассматриваемого состояния |ψ>. Это нужно как-то отметить. Можно, например, указать, о какой функции *С (х)* идет речь, поставив снизу индекс, скажем Сψ(*х*)*.* Хотя такое обозначение вполне подошло бы, но оно все же чуточку громоздко и в большинстве книг вы его не встретите. Обычно просто убирают букву *С* и пользуются символом ψ для опреде­ления функции

C:\Мои документы\gray.jpg

Поскольку это обозначение принято во всем мире, неплохо было бы и вам привыкнуть к нему и не пугаться, встретив его где-нибудь. Надо только помнить, что ψ теперь будет использоваться двояким образом. В (14.14) ψобозначает метку, которой мы отметили заданное физическое состояние электрона. А в (14.16) слева символ ψприменяется для определения математической функции от *х,* равной амплитуде, связываемой с каждой точкой *х* прямой. Надеемся, что это не слишком смутит вас, когда вы привыкнете к самой идее. Кстати, функцию ψ (*х*)обычно именуют «волновой функцией», потому что она очень часто имеет форму комплексной волны своих переменных.

Раз мы определили ψ (*х*)как амплитуду того, что электрон в состоянии ψ обнаружится в точке *х,* то хотелось бы интер­претировать квадрат абсолютной величины ψ как вероятность обнаружить электрон в точке *х.* Но, к сожалению, вероятность обнаружить электрон в точности в каждой данной точке равна нулю. Электрон в общем случае размазывается по какому-то участку прямой, и поскольку точек на каждом участке беско­нечно много, то вероятность оказаться в любой из них не может быть конечным числом. Вероятность обнаружить электрон мы можем описать только на языке *распределения* [вероятно­стей](#прим2)*,* которое дает относительную вероятность обнаружить электрон в различных неточно указанных местах прямой. Пусть Вер. *(х,* Δ*х*) обозначает вероятность обнаружить электрон в узком интервале Δ*х*: возле точки *х.* Если мы в каждой физичес­кой ситуации будем пользоваться достаточно мелким масшта­бом, то вероятность будет от точки к точке меняться плавно, и вероятность обнаружить электрон в произвольном конечном маленьком отрезке прямой Δ*х*; будет пропорциональна Δ*х.* И можно так изменить наши определения, чтобы это было учтено. Можно считать, что амплитуда <*x*|ψ> представляет своего рода «плотность амплитуд» для всех базисных состояний |*х*> *1* в узком интервале *х.* Поскольку вероятность обнаружить

iэлектрон в узком интервале Δ*х* вблизи *х* должна быть пропор­циональна длине интервала Δ*х*, мы выберем такое определение <*х* |ψ>*,* чтобы соблюдалось следующее условие: Вер. *(х,* Δ*х*)=| <x|ψ|>|2Δ*х*. Амплитуда <*x*|ψ> поэтому пропорциональна амплитуде того, что электрон в состоянии ψбудет обнаружен в базисном состоя­нии *х,* а коэффициент пропорциональности выбран так, что квадрат абсолютной величины амплитуды <*x*|ψ> дает *плот­ность вероятности* обнаружить электрон в любом узком интер­вале. Можно писать и так:

Вер. (*x*, Δ*х*)=| ψ (*х*)|2 Δ*х*. (14.17)

Теперь надо изменить некоторые наши прежние уравнения, чтобы согласовать их с этим новым определением амплитуды вероятности. Пусть имеется электрон в состоянии |ψ>, а мы хотим знать амплитуду того, что он будет обнаружен в дру­гом состоянии |ψ>, которое может соответствовать другим условиям размазанности электрона. Когда речь шла о конеч­ной системе дискретных состояний, мы пользовались уравне­нием (14.5). До изменения нашего определения амплитуд мы должны были писать

C:\Мои документы\gray.jpg

А теперь если обе эти амплитуды нормированы так, как описано выше, то сумма по всем состояниям из узкого интервала *х* будет эквивалентна умножению на Δ*x*, а сумма по всем значениям *х* превратится просто в интеграл. При наших измененных опре­делениях правильная формула будет такой:

C:\Мои документы\gray.jpg

Амплитуда <*x*|ψ> — это то, что мы теперь называем ψ (*х*)*;* точно так же амплитуду <*x*|ψ> мы обозначим ϕ(*х*)*.* Вспоминая, что <ϕ|*x*> комплексно сопряжена с <*x*|ϕ>, мы можем (14.18) переписать в виде

C:\Мои документы\gray.jpg

При наших новых определениях все формулы останутся преж­ними, если только всюду знак суммы заменить интегрирова­нием по *х.*

К тому, что было сказано, нужно сделать одну оговорку. Любая подходящая система базисных состояний должна быть полной, если хотят, чтобы она сполна отражала все, что проис­ходит. Для одномерного движения электрона в действитель­ности недостаточно указать только базисные состояния |*x*>, потому что в каждом из этих состояний спин электрона может быть направлен вверх или вниз. Один из способов получить полную систему — взять две совокупности состояний по *х*: одну для спина вверх, другую для спина вниз. Мы, впрочем, пока не будем входить в такие подробности.

**§ 3. Состояния с определенным импульсом**

Пусть у нас имеется электрон в состоянии |ψ>, описывае­мом амплитудой вероятности *(х*|ψ>=ψ (*х*)*.* Мы знаем, что ψ (*х*)обозначает состояние, в котором электрон размазан по прямой по какому-то закону, так что вероятность обнаружить его в узком интервале *dx* близ точки *х* попросту равна

Вер. *(х, dx)=*|ψ (*х*)|2*dx.*

Что можно сказать об импульсе этого электрона? Можно спро­сить, какова вероятность того, что импульс этого электрона равен *р*? Начнем с расчета амплитуды того, что состояние |ψ> присутствует в другом состоянии | имп. *p*>, которое мы опреде­лим как состояние с определенным импульсом *р.* Эту амплитуду можно найти, применяя наше основное уравнение для разло­жения амплитуд (14.20). В терминах состояний |имп. *p*>

C:\Мои документы\gray.jpg

А вероятность того, что у электрона будет обнаружен импульс *р,* выразится квадратом абсолютной величины этой амплитуды. Но опять возникает тот же вопрос насчет нормирования. Ведь вообще можно говорить только о вероятности обнаружить электрон с импульсом в узкой области *dp* близ значения *р.* Вероятность того, что импульс в точности равен *р,* равна нулю (разве что состояние |ψ> окажется состоянием с определенным импульсом). Только вероятность обнаружить импульс в интер­вале *dp* возле значения *р* может оказаться конечной. Нормиров­ку можно делать по-разному. Мы выберем тот способ нормиров­ки, который нам кажется особенно удобным, хотя вам сейчас это может так и не показаться.

Примем такую нормировку, чтобы вероятность была связана с амплитудой равенством

C:\Мои документы\gray.jpg

Это определение дает нам нормировку амплитуды <имп. *р*|*x*>. Амплитуда <имп. *р*|*х*>*,* естественно, комплексно сопряжена с амплитудой <*х*|имп. *р*>*,* а последнюю мы писали в (14.15). При нашей нормировке оказывается, что коэффициент пропор­циональности перед экспонентной как раз равен единице, т. е.

C:\Мои документы\gray.jpg

Тогда (14.21) превращается в

C:\Мои документы\gray.jpg

Вместе с (14.22) это уравнение позволяет находить распреде­ление импульсов для любого состояния |ψ>.

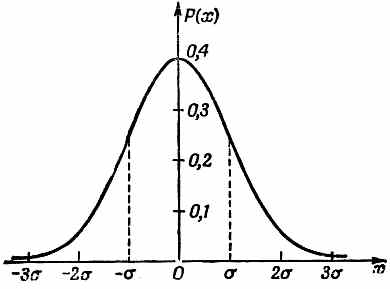
Возьмем частный пример: скажем, когда электрон распо­ложен в некоторой области вокруг *х=*0. Пусть мы взяли вол­новую функцию вида

C:\Мои документы\gray.jpg

Распределение вероятности иметь то или иное значение *х* для такой волновой функции дается ее квадратом

C:\Мои документы\gray.jpg

Функция плотности вероятности *Р*(*х*) *—* это кривая Гаусса, по­казанная на фиг. 14.1.



*фиг. 14.1. Плотность вероятности для волно­вой функции (14.24).*

Большая часть вероятности сосредото­чена между *х=+*σи *х=-*σ*.* Мы говорим, что «полуширина» кривой есть *а.* (Точнее, *а* равняется средней квадратичной координате *х,* если разброс координат соответствует этому распределению.) Коэффициент *К* следовало бы выбрать так, чтобы плотность вероятности *Р*(*х*)не просто была *пропорциональна* вероятности (на единицу длины ж) обнаружить электрон, но имела бы такой масштаб, чтобы *Р*(*х*)Δ*x* *равнялось* вероят­ности обнаружить электрон в Δ*x* вблизи *х.* Коэффициент *К,* при котором так и получается, можно найти из требования

\ *Р (х) dx*=1, потому что вероятность обнаружить электрон

где попало равна единице. [Мы находим, что](#прим3) *К* = (2πσ2)-1/4.

Теперь найдем распределение по импульсу. Пусть ϕ(*p*)

есть амплитуда того, что импульс электрона окажется равным *р*:

C:\Мои документы\gray.jpg

Подстановка (14.25) в (14.24) дает

C:\Мои документы\gray.jpg

что можно также переписать в форме

C:\Мои документы\gray.jpg

Сделаем теперь замену *C:\Мои документы\gray.jpg* интеграл обратится в

C:\Мои документы\gray.jpg

Математикам, вероятно, не понравился бы такой путь расчета, однако итог, несмотря на это, верен:

C:\Мои документы\gray.jpg

Мы пришли к интересному результату — распределение амплитуд по *р* имеет в точности ту же математическую форму, как и распределение амплитуд по *х,* только ширина кривой Гаусса иная. Можно записать это так:

C:\Мои документы\gray.jpg

где полуширина *η* распределения по *р* связана с полушириной *а* распределения по *х* формулой

C:\Мои документы\gray.jpg

Наш результат утверждает: если сделать распределение по *х* очень узким, взяв σ малым, то η станет большим и распре­деление по *р* сильно расползется. Или наоборот, если распределение по *р* узко, то оно соответствует широкому распределению по *х.* Мы можем, если угодно, рассматривать η *и* σкак некую меру неопределенности локализации импульса и коор­динаты электрона в изучаемом нами состоянии. Если обозначить их соответственно Δ*р* и Δ*x*, то (14.33) обратится в

C:\Мои документы\gray.jpg

Интересно вот что: можно доказать, что при всяком ином

виде распределения по *х* или по *р* произведение Δ*p*Δ*x* не может

стать меньше, чем у нас получилось. Гауссово распределение

дает наименьшее возможное значение произведения средних

квадратичных. В общем случае

C:\Мои документы\gray.jpg

Это количественная формулировка принципа неопределенности Гейзенберга, который качественно нам уже давно известен. Мы обычно делали приближенное утверждение: наименьшее значение произведения Δ*p*Δ*x* — это число порядка *h*.

**§ 4. Нормировка состояний с определенной координатой х**

Теперь мы вернемся к обсуждению тех изменений в наших основных уравнениях, которые необходимо сделать для работы с континуумом базисных состояний. Когда имеется конечное число дискретных состояний, то фундаментальное условие, которому должна удовлетворять система базисных состояний, имеет вид

C:\Мои документы\gray.jpg

Если частица пребывает в одном базисном состоянии, то ампли­туда пребывания в другом базисном состоянии равна нулю. С помощью подходящей нормировки можно так определить амплитуду <i|*j*>, чтобы она была равна единице. Оба эти условия содержатся в (14.36). Теперь мы хотим понять, как надо видоизменить это соотношение, когда пользуются базисными состояниями частицы на прямой. Если известно, что частица пребывает в одном из базисных состояний |*х*>, то какова ампли­туда того, что она пребывает в другом базисном состоянии |x'>? Если *х* и *х'* — две разные точки прямой, то амплитуда <*x*|*х'*>, конечно, есть нуль, что согласуется с (14.36). Но когда *х* и *х'* равны, то амплитуда <*x*|*х'* > не будет равна единице из-за той же старой проблемы нормировки. Чтобы увидеть, как надо все подправить, вернемся к (14.19) и применим это уравнение к частному случаю, когда состояние |ϕ> — просто-напросто базисное состояние |*х'*>*.* Тогда получится

C:\Мои документы\gray.jpg

Далее, амплитуда <x|ψ> *—* это как раз то, что мы назвали функцией ψ (*х*)*.* Подобно атому а амплитуда <*x*'|ψ>, по­скольку она относится к тому же состоянию ψ, является той же функцией переменной *х',* а именно ψ (*х'*)*.* Поэтому (14,37) можно переписать так;

C:\Мои документы\gray.jpg

Уравнение должно выполняться для любого состояния ψ и, стало быть, для любой функции ψ (*х*)*.* Это требование обязано полностью определить природу амплитуды <*x*|*х'),* которая, конечно, есть попросту функция, зависящая от *х* и *х'.*

Наша задача теперь состоит в том, чтобы отыскать функцию *f*(*х, х'*)*,* которая после умножения на ψ (*х*)и интегрирования по всем *х* даст как раз величину ψ (*х'*)*.* Но оказывается, что не существует математической функции, которая это умеет делать! По крайней мере не существует ничего похожего на то, что мы обычно имеем в виду под словом «функция».

Выберем какое-нибудь значение *х',* например 0, и опреде­лим амплитуду <0|*x*> как некую функцию *х,* скажем *f*(*х*)*.* Тогда (14.38) обратится в

C:\Мои документы\gray.jpg

Какого же вида функция *f*(*х*)могла бы удовлетворить такому уравнению? Раз интеграл не должен зависеть от того, какие значения принимает ψ (*х*)при *х,* отличных от нуля, то ясно, что *f*(*х*)должна быть равна нулю для всех значений *х,* кроме нуля. Но если *f*(*х*)всюду равна нулю, то интеграл будет тоже равен нулю, и уравнение (14.39) не удастся удовлетворить. Возникает невозможная ситуация: нам нужно, чтобы функция была нулем всюду, кроме одной точки, и давала все же конечный интеграл. Что ж, раз мы не в состоянии сыскать функцию, которая так поступает, то простейший выход — просто *сказать,* что функция *f(х) определяется* уравнением (14.39). И именно *f(х) —* такая функция, которая делает (14.39) правильным. Функция, которая умеет это делать, впервые была изобретена Дираком и носит его имя. Мы обозначаем ее δ (*х*)*.* Все, что о ней утверждается — это что функция δ(*х*)обладает странным свойством: если ее подставить вместо *f*(*х*)в (14.39), то интеграл выберет то значе­ние, которое ψ (*х*)принимает при *х=*0*;* и поскольку интеграл не должен зависеть от ψ (*х*)при *х,* отличных от нуля, то функция δ(*х*)должна быть нулем всюду, кроме *х=*0*.* Словом, мы пишем

<0|*x*>=δ(*x*), (14.40)

где δ (*х*)определяется соотношением

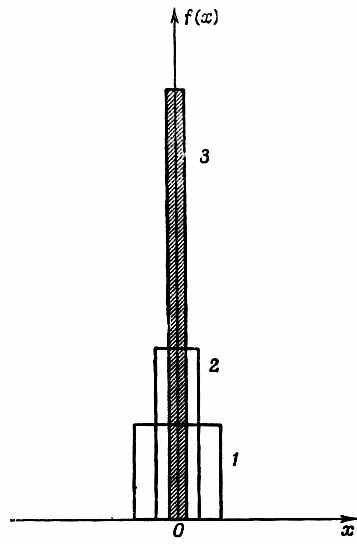
C:\Мои документы\gray.jpg

Посмотрите, что выйдет, если вместо ψ в (14.41) поставить частную функцию «1». Тогда получится

C:\Мои документы\gray.jpg

Иначе говоря, функция δ(*х*)обладает тем свойством, что всюду, кроме *х=*0*,* она равна нулю, но интеграл от нее конечен и равен единице. Приходится вообразить, что функция δ(*х*) обладает в одной точке такой фантастической бесконечностью, что полная площадь оказывается равной единице.

Как представить себе, на что похожа δ-функция Дирака? Один из способов — вообразить последовательность прямо­угольников (или другую, какую хотите функцию с пиком), которая становится все уже и уже и все выше и выше, сохраняя все время единичную площадь, как показано на фиг. 14.2.

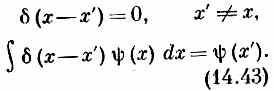


*Фиг. 14.2. Последователь­ность функций, ограничиваю­щих единичную площадь, вид которых все сильнее и сильнее напоминает δ-функцию.*

Интеграл от этой функции от -∞ до +∞ всегда равен единице. Если вы умножите ее на произвольную функцию ψ(*х*)и проин­тегрируете произведение, то получите нечто, приближенно сов­падающее со значением функции при *х=*0*,* причем приближение становится все лучше и лучше, по мере того как прямоугольники становятся уже и уже. Если хотите, можете представлять δ-функцию посредством такого рода предельного процесса. Но единственно здесь важно то, что δ-функция определена так, что (14.41) справедливо для каждой волновой функции ψ (*х*)*.*

Это однозначно определяет δ-функцию. Ее свойства тогда получаются такими, как было сказано.

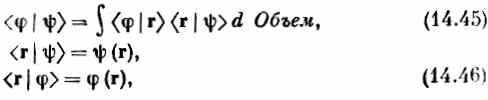
Заменим аргумент δ-функции с *х* на *х- х',* и соотношения обратят­ся в δ(*х-x*')=0,

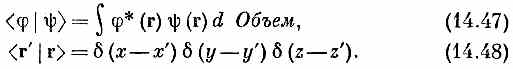
**

Если в (14.38) вместо амплитуды <*x*|*х'*> подставить δ(*x*- *х'*)*,* то это уравнение будет выполнено. В итоге получаем, что для наших базисных состояний с координатой *х* условие, соответствующее формуле (14.36), имеет вид

<*x*'|*x*>=δ(*x*-*х'*)*.* (14.44)

Теперь мы завершили все необходимые видоизменения наших основных уравнений, нужные для работы с континуумом ба­зисных состояний, соответствующих точкам на прямой. Обобще­ние на три измерения вполне очевидно: во-первых, координата *х* заменяется вектором **r**; во-вторых, интегралы по *х* заменяются на интегралы по *х, у* и z (иными словами, они становятся интегралами по объему); в-третьих, одномерную δ-функцию надо заменить просто произведением трех δ-функций от *x*, от *y* и от *z*: δ (*х-х'*) δ *(у- у'*) δ (*z-z'*). Собирая все вместе, получаем следующую совокупность уравнений для амплитуд частицы в трехмерном мире:





А что бывает, когда частиц не одна, а больше? Мы расскажем вам, как управляться с двумя частицами, и вы сразу поймете, что нужно делать, если вам понадобится оперировать с несколь­кими частицами. Пусть имеются две частицы; назовем их № 1 и № 2. Что применить в качестве базисных состояний? Одну вполне приемлемую совокупность можно задать, сказав, что частица № 1 находится в *х*1*,* а частица № 2 — в *х*2*,* и записав это в виде

|*x*1, *х*2>*.* Заметьте, что указание координаты *только одной ча­стицы не определяет* базисного состояния. Каждое базисное состояние обязано определять условия всей системы целиком. Вы не должны думать, что каждая частица движется независимо как трехмерная волна. Всякое физическое состояние |ψ> можно определить, задав все амплитуды <*x*1*, х*2|ψ> того, что пара частиц будет обнаружена в *х*1и *x*2*.* Эта обобщенная амплитуда поэтому является функцией *двух* совокупностей координат *x*1 и *x*2. Вы видите, что такая функция — это уже не волна в смысле колебания, которое разбегается в трех измерениях. Точно так же это и не простое произведение двух самостоятельных волн, по одной для каждой частицы. Это в общем случае какая-то волна в шести измерениях, определяемых числами *х*1и *x*2*.* Если в при­роде имеются две взаимодействующие частицы, то не существует способа описать то, что происходит с одной из частиц, попытав­шись выписать волновую функцию для нее одной. Известные парадоксы, которые мы рассматривали в первых главах (где объявлялось, что измерения, проделанные над одной частицей, в состоянии предсказать, что будет с другой, или что они могут разрушить интерференцию), причинили людям много неприятностей, потому что они пытались придумывать волновую функцию одной отдельной частицы вместо правильной волновой функции координат обеих частиц. Полное описание можно правильно провести только в терминах функций координат обеих частиц.

**§ 5. Уравнение Шредингера**

До сих пор мы просто заботились о том, как бы записать состояния, которые бы учитывали, что электрон может находить­ся в пространстве где угодно. Теперь же следует позаботиться о включении в наше описание *физики* того, что может произойти в тех или иных обстоятельствах. Как и прежде, надо подумать о том, как состояния будут меняться со временем. Если у нас есть состояние |ψ>, которое несколько позже переходит в дру­гое состояние |ψ>, то положение в любой момент мы сможем описать, сделав волновую функцию (т. е. попросту амплитуду <**r**|ψ>) функцией не только координат, но и времени. Частицу в данных условиях можно будет тогда описывать, задавая меняющуюся во времени волновую функцию ψ (**r**, *t) =*ψ *(х, у, z, t).* Эта меняющаяся во времени волновая функция описывает эво­люцию последовательных состояний, которая происходит с тече­нием времени. Это так называемое «координатное представле­ние»; оно дает проекции состояния |ψ> на базисные состояния |**r**> и не всегда может считаться самым удобным, но мы с него

и начнем.

В гл. 6 мы описали на языке гамильтониана *Нij.,* как состоя­ния меняются во времени. Мы видели, что временная вариация различных амплитуд дается матричным уравнением

C:\Мои документы\gray.jpg

Это уравнение говорит, что изменение во времени каждой из амплитуд *Сi* пропорционально сумме всех прочих амплитуд *Сj*

с коэффициентами *Нij.*

Как должно выглядеть (14.49) при континууме базисных состояний |*x*>? Вспомним сперва, что (14.49) можно также запи­сать в виде

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь ясно, что делать. Для *x*-представления следует писать

*C:\Мои документы\gray.jpg*

Сумма по базисным состояниям |*j*> заменяется интегралом по *х'.* Поскольку <*х*|*Н^*|*х'*>должна быть какой-то функцией от *x* и *х*', запишем ее как *Н (х, х'),* что соответствует *Н if* в (14.49). Тогда (14.50) это то же самое, что

C:\Мои документы\gray.jpg

где

*C:\Мои документы\gray.jpg*

Согласно (14.51), быстрота изменения ψ в точке *х* зависела бы от значений ψ во всех других точках *х*'; множитель *Н(х, х')* — это амплитуда (в единицу времени) того, что электрон перепры­гнет из *х'* в *x*. Оказывается, однако, что *в природе эта амплитуда всюду, кроме точек х' , очень близких к х, равна нулю.* Это озна­чает, как мы видели на примере цепочки атомов в начале главы [см. (14.12)], что правая часть (14.51) может быть полностью выражена только через ψ и ее производные по z в точке *х.*

Для частицы, которая свободно движется в пространстве, не подвергаясь действию каких-либо сил и возмущений, пра­вильный физический закон таков:

C:\Мои документы\gray.jpg

Откуда это получается? Это невозможно вывести из чего-либо нам уже известного. Это рождено в голове Шредингера, это вы­думано им в битве за понимание экспериментальных наблюдений реального мира. Может быть, какой-то ключ к тому, почему так должно быть, вам дадут размышления по поводу нашего вывода уравнения (14.12), которое проистекло из рассмотрения распро­странения электрона в кристалле.

Конечно, от свободных частиц проку мало. Что будет, если к частице приложить силы? Что ж, если действующая на частицу сила может быть описана с помощью скалярного потенциала *V*(*х*)(что означает, что речь идет не о магнитных силах, а об электрических) и если мы ограничимся низкими энергиями, чтобы иметь право пренебрегать теми сложностями, которые возникают при релятивистском движении, то гамильтониан, который укладывается в реальный мир, таков:



Опять-таки некоторый ключ к происхождению этого уравнения вы получите, если вернетесь к движению электрона в кристалле и посмотрите, как надо изменить уравнения, если энергия электрона медленно меняется от атома к атому, как если бы к кристаллу было приложено электрическое поле. Тогда член *Е*0 в (14.7) будет медленно меняться в зависимости от места и будет соответствовать новому слагаемому, появившемуся в (14.52). [Вас может удивить, отчего мы сразу перешли от (14.51) к (14.52), а не дали правильного выражения для амплитуды *Н(х, х')=<х*|*Н^|х'*>*.* Да потому, что *Н (х , х')* можно написать только с помощью необычных алгебраических функций, а инте­грал в правой части (14.51) выражается через привычные вещи. Если вам это в самом деле интересно, то вот смотрите: *Н (х, х')* можно записать так:

C:\Мои документы\gray.jpg

где δ'' означает вторую производную 6-функции. Эту довольно странную функцию можно заменить чуть более удобным и пол­ностью ей равнозначным алгебраическим выражением

C:\Мои документы\gray.jpg

Мы *не будем* пользоваться этими формулами, а прямо будем рабо­тать с (14.52).]

Если теперь взять выражение (14.52) и подставить в (14.50) вместо интеграла, то для ψ(*х*)*=<х*|ψ> получится дифферен­циальное уравнение

C:\Мои документы\gray.jpg

Совершенно очевидно, что надлежит поставить вместо (14.53),

если нас интересует трехмерное движение. Надо только *d*2*/dx*2

заменить на

C:\Мои документы\gray.jpg

а *V*(*х*)заменить на *V*(*x, у, z*)*.* Для электрона, движущегося в поле с потенциалом *V (х, у,* z), амплитуда ψ*(х, у, z)* удовлетво­ряет дифференциальному уравнению

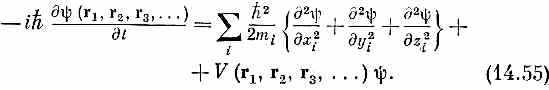
C:\Мои документы\gray.jpg

Называется оно уравнением Шредингера и было первым извест­ным квантовомеханическим уравнением. Его написал Шредин­гер, прежде чем было открыто любое другое описанное в этом томе уравнение.

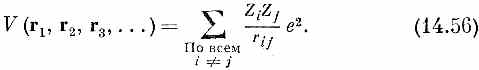
Хотя мы здесь пришли к нему совсем иным путем, но появле­ние этого уравнения в 1926 г., когда Шредингер впервые его написал, явилось великим историческим моментом, отметившим рождение квантовомеханического описания материи. Многие годы внутренняя атомная структура вещества была великой тайной. Никто не был в состоянии понять, что скрепляет вещест­во, отчего существует химическая связь, и, особенно, как атомам удается быть устойчивыми. Хотя Бор и смог дать описание внут­реннего движения электрона в атоме водорода, которое, каза­лось бы, объясняло наблюдаемый спектр лучей, испускаемых этим атомом, но причина, отчего электроны движутся именно так, оставалась тайной. Шредингер, открыв истинные уравне­ния движения электронов в масштабах атома, снабдил нас тео­рией, которая позволила рассчитать атомные явления количест­венно, точно и подробно. В принципе его уравнение способно объяснить все атомные явления, кроме тех, которые связаны с магнетизмом и теорией относительности. Оно объясняет уровни энергии атома и все, что касается химической связи. Но, ко­нечно, это объяснение только в принципе. Математика вскоре становится столь сложной, что точно решить удается только простейшие задачи. Одни лишь атомы водорода и гелия были рассчитаны с высокой точностью. Однако путем различных при­ближений, порой весьма сомнительных, можно многое понять и в более сложных атомах и в химической связи молекул. Некоторые из этих приближений были показаны в предыдущих главах.

Уравнение Шредингера в том виде, в каком мы его записали, не учитывает каких-либо магнитных эффектов. Их, правда, можно приближенно принять во внимание, добавив в уравнение еще другие члены. Но, как мы убедились раньше, магнетизм — это эффект существенно релятивистский, так что правильное опи­сание движения электрона в произвольном электромагнитном поле можно обсуждать только в рамках надлежащего релятиви­стского уравнения. Правильное релятивистское уравнение для движения электрона было открыто Дираком через год после того, как Шредингер придумал свое уравнение; оно имеет со­вершенно другой вид. Мы его не успеем здесь изучить.

Прежде чем перейти к рассмотрению некоторых следствий из уравнения Шредингера, хотелось бы продемонстрировать, как оно выглядит для системы многих частиц. Мы не будем им пользоваться, а просто хотим показать вам его, чтобы подчерк­нуть, что волновая функция ψ не просто обычная волна в про­странстве, а функция многих переменных. Если частиц много, уравнение превращается в



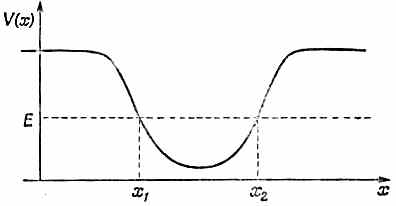
Потенциальная функция *V* — это то, что классически соответст­вует полной потенциальной энергии всех частиц. Если на ча­стицы не действуют внешние силы, то функция *V* есть попросту электростатическая энергия взаимодействия всех частиц. Иначе говоря, если заряд *i*-й частицы равен *Ziqe,* то функция *V* [просто равна](#прим4)



**§ 6. Квантованные уровни энергии**

В одной из последующих глав мы на каком-нибудь примере более подробно разберем решение уравнения Шредингера. А сейчас мы хотим показать вам, как получается одно из самых замечательных следствий из уравнения Шредингера — тот поразительный факт, что из дифференциального уравнения, в которое входят только непрерывные функции непрерывных пространственных переменных, могут возникнуть квантовые эффекты, как, например, дискретные уровни энергии в атоме. Нам надо понять следующий существенный факт: как это может быть, что энергия электрона, попавшего в потенциальный «колодец» и вынужденного оставаться в определенной области пространства, с необходимостью принимает значения только из точно определенной дискретной их совокупности.

Пусть речь идет об одномерном случае движения электрона, когда потенциальная энергия меняется по *х* так, как показано па фиг. 14.3.



*Фиг. 14.3. Потенциальная яма для частицы, движущейся вдоль оси х.*

Предположим, что потенциал является статиче­ским: со временем он не меняется. Как уже мы делали много раз, поищем решения, отвечающие состояниям определенной энергии, т. е. определенной частоты. Испытаем такую форму

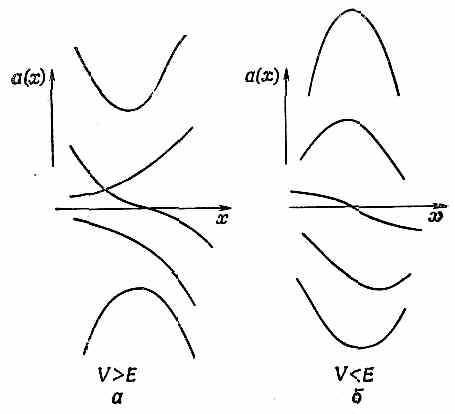
решения:

*C:\Мои документы\gray.jpg*

Если мы эту функцию подставим в уравнение Шредингера, то увидим, что функция *а(х)* обязана подчиняться следующему дифференциальному уравнению:

*C:\Мои документы\gray.jpg*

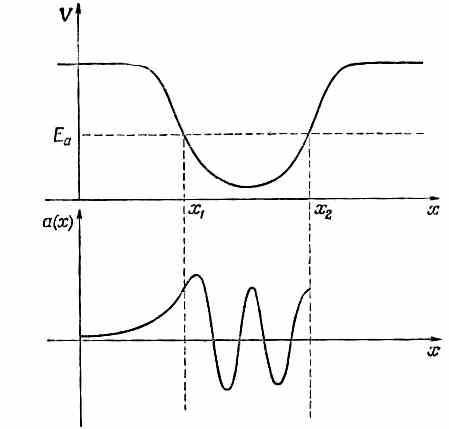
Это уравнение говорит, что, каково бы ни было *х,* вторая про­изводная *а(х)* по *х* пропорциональна а*(х)* с коэффициентом пропорциональности *V-Е.* Вторая производная от *а (х)* это скорость изменения наклона *а (х).* Если потенциал *V* больше энергии *Е* частицы, то скорость изменения наклона *а (х)* будет иметь тот же знак, что и а *(х).* Это значит, что кривая *а(х)* по­вернута выпуклостью к оси *х,* т. е. более или менее следует ходу положительной или отрицательной экспоненты е±x. Это озна­чает, что на участке слева от *х*1(см. фиг. 14.3), где *V* больше предполагаемой энергии *Е,* функция *а (х)* будет напоминать одну из кривых на фиг. 14.4, *а.*



*Фиг. 14.4. Возможные формы волновой функции а(х) при V>E и при V<E.*

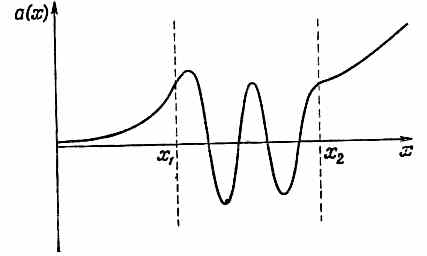
Если же потенциальная функция *V* меньше энергии *Е,* то знак второй производной *а (х)* по *х* противоположен знаку самой *а*(*х*)и кривая *a*(*х*)будет всегда вогнута к оси *х,* подобно одной из линий на фиг. 14.4, *б.* Решение на этом участке при­обретет форму кусочков синусоид.

Теперь поглядим, можем ли мы графически построить реше­ние для функции *а*(*х*)*,* отвечающей частице с энергией *Еа* при потенциале *V,* показанном на фиг. 14.5. Раз нас интересует такое положение, когда частица заключена *внутри* потенциальной ямы, то мы будем искать решения, при которых амплитуда волны принимает после удаления *х* за пределы потенциальной ямы очень малые значения. Мы очень легко можем представить себе кривую наподобие изображенной на фиг. 14.5, стремящуюся к нулю при больших отрицательных *х* и плавно поднимающуюся при приближении к *х*1*.* Поскольку *V* в точке *х*1равно *Еа,* то кривизна функции в этой точке равна нулю. Между *х*1и *х*2 величина *V-Еа* всегда отрицательна, так что функция *а*(*х*) все время вогнута к оси, а кривизна тем больше, чем больше разность между *Еа* и *V.* Если продолжить кривую в область между *x*1и *x*2, ей придется идти примерно так, как на фиг. 14.5.



*Фиг. 14.5. Волновая функция для энергии Еа, стремящаяся к нулю при удалении х в отрицательную сторону.*

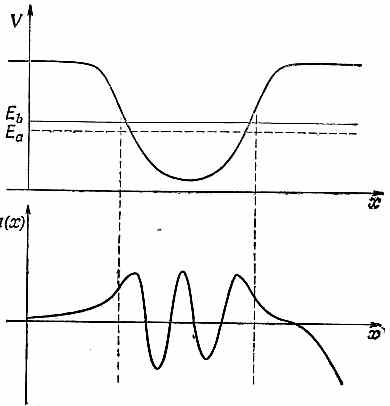
Теперь протянем эту кривую правее *х*2*.* Там она искрив­ляется прочь от оси и движется к большим положительным зна­чениям (фиг. 14.6).



*Фиг. 14.6. Волновая функция а(х) (см. фиг. 14.5), продолженная за x2.*

Для выбранной нами энергии *Еа* решение *a*(*х*)с ростом *х* растет все сильнее и сильнее. Действительно, ведь и *кривизна* решения *а*(*х*)тоже возрастает (если потенциал остается почти постоянным). Амплитуда круто вырастает до гигантских масштабов. Что это означает? Просто что частица не «связана» потенциальной ямой. Обнаружить ее *вне* ямы беско­нечно более вероятно, чем *внутри.* Для изготовленного нами решения гораздо более вероятно встретить электрон в *x*=+∞, чем где-либо еще. Найти решение для связанной частицы нам не удалось.

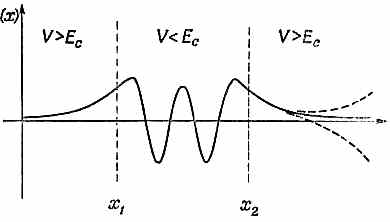
Что ж, попробуем взять другую энергию, скажем, чуточку повыше чем *Еа,* например *Еb* (фиг. 14.7).



*фиг. 14.7. Волновая функция а(х) для энер­гии eb, большей чем Еа.*

Если слева условия останутся теми же, то мы придем к решению, показанному на нижней части фиг. 14.7. На первых порах оно выглядит получ­ше, нов конце концов оказывается таким же плохим, как и решение для *Еа,* только теперь при возрастании *x* ве­личина *а(х)* стано­вится все более и бо­лее *отрицательной.*

Может быть, в этом разгадка! Раз небольшое изменение энергии от *Еа* к *Еb* приводит к тому, что кривая перебрасывается с одной стороны оси на другую, то, может быть, существует энергия, лежащая между *Еа* и *Еb,* при которой кривая для боль­ших *х* будет стремиться к нулю. Так оно и есть, и мы на фиг. 14.8изобразили, как может выглядеть решение.

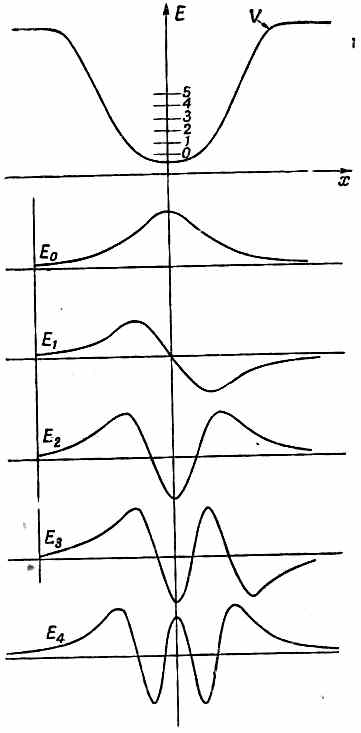


*Фиг. 14.8. Волновая функция для анергии Еc между Еа и Еb.*

Вам нужно понимать, что решение, показанное на рисунке, это весьма частное решение. Если бы мы даже чуть-чуть подняли или снизили энергию, то функция перешла бы в другие кривые, похожие на одну из штриховых кривых фиг. 14.8, и опять для связанной частицы не получилось бы надлежа­щих условий. Мы пришли к выводу, что если частица должна находиться в потен­циальной яме, то это мо­жет с ней случиться толь­ко при вполне определен­ной энергии.

Значит ли это, что у частицы, находящейся в связанном состоянии в по­тенциальной яме, может быть только одна энергия? Отнюдь. Могут быть и другие, но не слишком близко к *Ес.* Обратите внимание, что волновая функция на фиг. 14.8 четы­ре раза пересекает ось на участке *х*1*х*2*.* Если бы мы выбрали энергию значи­тельно ниже *Ес,* то могло бы получиться решение, которое бы пересекло ось только трижды, только дважды, только единожды или ни разу. Возможные

решения намечены на фиг. 14.9.



*Фиг. 14.9. Функция а(х) для пяти связанных состояний с наинизшими энергиями.*

(Могут быть и решения, отве­чающие более высоким энергиям.) Вывод состоит в том, что если частица загнана в потенциальную яму, то ее энергия прини­мает только определенные специальные значения, образующие дискретный энергетический спектр. Вы понимаете теперь, как способно дифференциальное уравнение описать этот основной факт квантовой физики.

Следует заметить только одно. Если энергия *Е* выше верха потенциальной ямы, то дискретных решений уже не будет, и разрешены все мыслимые энергии. Такие решения отвечают рассеянию свободных частиц на потенциальной яме. Пример таких решений мы видели, когда рассматривали влияние атомов примесей в кристалле.

***\* Помните, еще раньше мы условились, что C:\Мои документы\gray.jpg***

***\* Был использован тот факт, что C:\Мои документы\gray.jpg см. вып. 1***

***\* О распределениях вероятностей шла речь в гл. 6, § 4 (вып. 1).***

***\* Представьте себе, что по мере сближения точек хn амплитуда А прыжков из хn 1 в хn возрастает.***

***Главa 15***

[**СИММЕТРИЯ И ЗАКО****НЫ СОХРАНЕНИЯ**](#прим1)

[**§ 1. Си****мметрия**](#a1)

[**§ 2. Симмет****рия и ее сохранение**](#a2)

[**§ 3. Законы сох****ранения**](#a3)

[**§ 4. Поляризова****нный свет**](#a4)

**§** [**5. Рас****пад** **Λ°**](#a5)

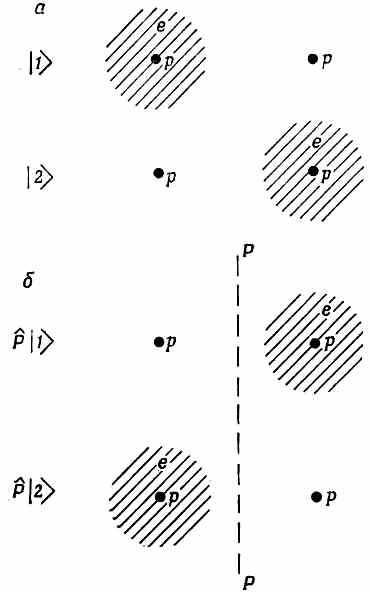
[**§ 6. Сводка м****атр****иц поворота**](#a6)

*Повторить:* гл. 52 (вып. 4} «Сим­метрия законов физики»

**§ 1. Симметрия**

В классической физике немало величин (та­ких, как импульс, энергия и момент количества движения) *сохраняется.* Теоремы о сохранении соответствующих величин существуют и в кван­товой механике. Самое прекрасное в квантовой механике это то, что теоремы сохранения в опре­деленном смысле удается в ней вывести из чего-то другого; в классической же механике они сами практически являются исходными для других законов. (Можно, правда, и в классиче­ской механике поступать так же, как в кванто­вой, но это удается только на очень высоком уровне.) В квантовой механике, однако, законы сохранения очень тесно связаны с принципом суперпозиции амплитуд и с симметрией физи­ческих систем относительно различных измене­ний. Это и есть тема настоящей лекции. Хотя идеи эти мы будем применять главным образом к сохранению момента количества движения, но существенно здесь то, что все теоремы о сохранении каких угодно величин всегда связа­ны — в квантовой механике — с симметриями системы.

Начнем поэтому с изучения вопроса о симметриях систем. Очень простым примером слу­жат молекулярные ионы водорода (впрочем, в равной степени подошли бы и молекулы ам­миака), у которых имеется по два состояния. У молекулярного иона водорода за одно базис­ное состояние мы принимали такое состояние, когда электрон расположен возле протона № 1, а за другое базисное со­стояние то, в котором электрон располагался возле протона № 2. Эти два состояния (мы их называли |*1*> и |*2*>) мы снова показываем на фиг. 15.1, *а.*

**

*Фиг. 15.1. Если состояния |1> и |2> отразить в плоскости Р—Р, они перейдут соответ­ственно в состояния |2> и |1>.*

И вот, по­скольку оба ядра в точ­ности одинаковы, в этой физической системе име­ется определенная *сим­метрия.* Иначе сказать, если бы нам пришлось *отразить* систему в пло­скости, поставленной по­средине между двумя протонами (имеется в виду, если бы все находящееся с одной стороны плоскости симметрично перешло на другую сторону), то возникла бы картина, представленная на фиг. 15.1, *б.* А коль скоро протоны тождественны, *операция отражения* пе­реводит |*1*>в |*2*>, а |*2>* в |*1*>. Обозначим эту операцию отражения *Р^* и напишем

C:\Мои документы\gray.jpg

Значит, наше *Р^ —* это оператор, в том смысле, что он *«что-то делает» с* состоянием, чтобы вышло новое состояние. Интересно здесь то, что *Р^,* действуя на любое состояние, создает какое-то *другое* состояние системы.

Далее, у *Р^,* как у всякого другого оператора, с которыми мы встречались, есть матричные элементы, которые можно определить с помощью обычных очевидных обозначений. Именно

C:\Мои документы\gray.jpg

суть матричные элементы, которые получаются, если *Р^ |1*> и

*Р^|2*>умножить слева на <*1*| . Согласно уравнению (15.1), они равны

*C:\Мои документы\gray.jpg*

Таким же путем можно получить и Р21, и Р22. Матрица *Р^ относительно базисной системы|1*> и|*2*> есть

*C:\Мои документы\gray.jpg*

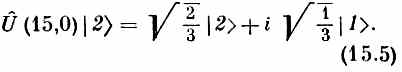
Мы снова убеждаемся, что слова *оператор* и *матрица* в кван­товой механике практически взаимозаменяемы. Есть, конечно, легкие технические различия, как между словами «числитель­ное» и «число», но мы не такие педанты, чтобы забивать себе этим голову. Так что будем именовать *Р^* то оператором, то мат­рицей, независимо от того, определяет ли оно операцию или реально использовано для получения численной матрицы.

Теперь мы хотели бы кое на что обратить ваше внимание. *Предположим,* что *физика* всей системы молекулярного иона водорода сама по себе *симметрична.* Этого могло бы и не быть — это зависит, например, от того, что находится с нею рядом. Но если система симметрична, то с необходимостью должна быть справедлива следующая идея. Предположим, что вначале, при *t=*0*,* система находится в состоянии |*1*>, а через промежуток времени *t* мы обнаруживаем, что система оказалась в более сложном положении — в какой-то линейной комбинации обоих базисных состояний. Вспомните, что в гл. 6 (вып. 8) мы привыкли представлять «эволюцию во времени» умножением на оператор *U^.* Это означает, что система через мгновение (скажем для опреде­ленности, через 15 *сек)* окажется в каком-то ином состоянии.

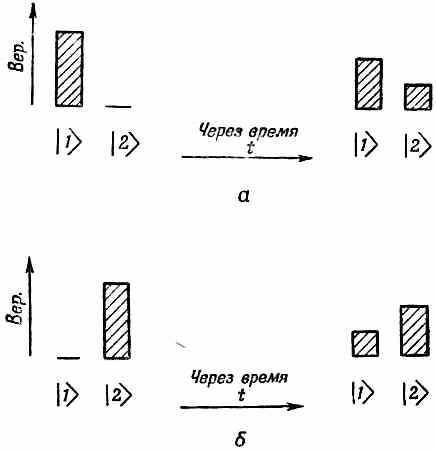
Например, это состояние на √ 2/3 может состоять из состояния |*1*> и на *i*√1/3 из состояния |*2*>, и мы бы написали

|ψ на 15-й секунде>*=C:\Мои документы\gray.jpg*.(15.4)

Теперь спросим: что же произойдет, если вначале мы запустим систему *в симметричном* состоянии |*2*> и при *тех же условиях* подождем 15 *сек?* Ясно, что если мир симметричен (что мы и предполагаем), то обязательно *получится* состояние, симметрич­ное с (15.4):

|ψна 15-й секунде>= **

Те же идеи схематично изображены на фиг. 15.2.



*Фиг. 15.2. Если в симметричной системе чистое состояние |1*> *развивается во вре­мени так, как показано в части (а), то чистое состояние |2*> *будет во времени развиваться так, как показано в части (б).*

Итак, если *физика* системы симметрична относительно некоторой плоскости и мы рассчитали поведение того или иного состояния, то нам также известно поведение состояния, которое получилось бы после отражения исходного состояния в плоскости симметрии.

То же самое можно высказать чуть более общо, т. е. чуть более отвлеченно. Пусть *Q^ —* любая из множества операций, которые вы можете произвести над системой, *не меняя физики.* К примеру, за *Q^* мы можем принять операцию отражения в пло­скости, расположенной посредине между двумя атомами моле­кулы водорода. Или в системе с двумя электронами можно было бы под *Q^* подразумевать операцию *обмена* двумя электронами. Третьей возможностью явилась бы в сферически симметричной системе операция *поворота* всей системы на конечный угол вокруг некоторой оси; от этого физика не изменится. Конечно, в каждом отдельном случае мы бы обозначали *Q^* по-своему. В частности, через *R^y* (θ) мы обычно будем обозначать операцию «поверни систему вокруг оси *у* на угол θ». Под *Q^* мы просто понимаем один из названных операторов или любой другой, который оставляет всю физическую ситуацию неизменной.

Оператор *Q^* мы будем называть *оператором симметрии* для системы.

Вот вам еще примеры операторов симметрии. Если у нас имеется атом, а *внешнее магнитное* или *внешнее электрическое* поле отсутствует, то после поворота системы координат вокруг любой оси физическая система остается той же самой. Опять-таки молекула аммиака симметрична относительно отражения в пло­скости, параллельной той, в которой лежат три атома водорода (пока нет электрического поля). Если есть электрическое поле, то при отражении надо было бы обратить и поле, а это меняет всю физическую задачу. Но пока внешнего поля нет, молекула симметрична.

Теперь рассмотрим общий случай. Положим, мы начали с состояния |ψ1>, а через некоторое время или под влиянием других физических условий оно превратилось в состояние |ψ2>. Напишем

**C:\Мои документы\gray.jpg**

[Посмотрите на формулу (15.4).] Теперь вообразите, что над всей системой мы проводим операцию *Q^.* Состояние |ψ1> преобра­зится в состояние |ψ'1>, которое также записывается в виде *Q^|*ψ1>*.* А состояние |ψ2> превращается в |ψ'2>=*Q*^|ψ2>. И вот, *если физика* симметрична относительно *Q^* (не забывайте про это, *если* это отнюдь не общее свойство системы), тогда, подождав в тех же условиях то же время, мы должны получить

C:\Мои документы\gray.jpg

[Как в (15.5).] Но вместо |ψ'1> можно написать *Q^*|ψ1>, а вместо |ψ2> написать *Q^* |ψ2>, так что (15.7) переписывается в виде

*C:\Мои документы\gray.jpg*

Теперь, если |ψ2> заменить на *U^* |ψ1> [см. (15.6)], то получим

*C:\Мои документы\gray.jpg*

Нетрудно понять, что это значит. В отношении атома водорода это означает, что «отразить и после немного подождать» [правая часть (15.9)] — это то же самое, что «немного подождать, а после отразить» [левая часть (15.9)]. Они должны совпасть, если толь­ко *U*^при отражении не меняется.

А поскольку (15.9) справедливо при *любом* исходном со­стоянии | ψ 1>*,* то на самом деле это уравнение для операторов

*C:\Мои документы\gray.jpg*

Это-то мы и хотели получить — *математическую формулировку симметрии.* Когда соблюдается (15.10), мы говорим, что операторы *U^* и *Q^ коммутируют.* Тогда «симметрию» можно *опреде­лить* следующим образом: физическая система *симметрична* относительно операции *Q^,* когда *Q^* коммутирует с *U^ (с* опера­цией прошествия времени). [На языке матриц произведение двух операторов равнозначно матричному произведению, так что (15.10) в системе, симметричной относительно преобразова­ния *Q^,* выполняется и для матриц *Q^* и *U^.]*

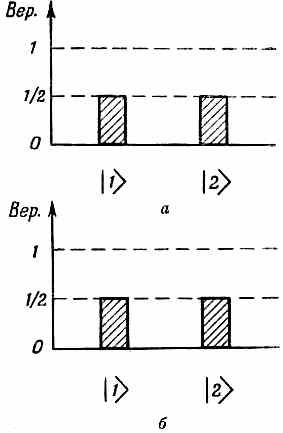
Кстати, поскольку для бесконечно малого времени 8 мы имеем [7=1 — *iH^ε/h,* где *H^* — обычный гамильтониан [см. гл. 6 (вып. 8)1, то легко видеть, что когда (15.10) выполнено, то вы­полнено и

*C:\Мои документы\gray.jpg*

Так что (15.11) есть математическая формулировка условий на симметричность физической ситуации относительно оператора *Q^.* Она *определяет* симметрию.

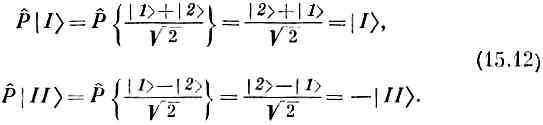
**§ 2. Симметрия и ее сохранение**

Прежде чем применять только что найденный результат, хотелось бы еще немного вникнуть в идею симметрии. Положим, что стечение обстоятельств таково, что после действия опера­тора *Q^* на состояние получается опять то же состояние. Это очень частный случай, но все же допустим, что так сложилось, что состояние |ψ'>=Q^|ψ0>. физически совпадает с состоянием |ψ0>. Это значит, что |ψ'> равняется |ψ0>, если не считать не­которого [фазового множителя](#прим2). Как это себе представлять? Пусть, например, имеется ион H+2 в состоянии, которое мы когда-то обозначали |*I*>. У этого состояния имеется одинаковая ам­плитуда побывать в базисных состояниях |*1*> и |*2*>. Вероят­ности показаны столбиками на фиг. 15.3, *а.*

**

*Фиг. 15.3. Состояние* |*I*> *и состояние P^*|*I*>, *получае­мые отражением* |*I*> *в плоскости, проходящей посреди­не между атомами в ионе* Н2+.

Если мы на состояние |*I*> подействуем оператором отраже­ния *Р^,* он перевернет его, поменяв местами |*1*> с|*2*>*,* а |*2*> с|*1*>; полу­чатся вероятности, по­казанные на фиг. 15.3,б. Перед нами опять состояние |*I*>. Если начать с состояния |*II*>, то вероятности до и после отражения будут выглядеть тоже одинаково. Правда, если посмотреть на *ампли­туды,* то разница все же есть. У состояния |*I*> после отраже­ния амплитуды останутся *теми же,* у состояния | //) они приобретут противоположный знак. Иными словами,



Если написать *C:\Мои документы\gray.jpg*, то у состояния |*I*> мы имеем е*iδ*=1, а у состояния |*II*> имеем е*iδ*=-1.

Возьмем другой пример. Пусть у нас есть правополяризованный по кругу фотон, распространяющийся в направлении z. Если мы совершим операцию поворота вокруг оси z, то, как мы знаем, это просто приведет к умножению амплитуды на *eiϕ,* где ϕ — угол поворота. Значит, в этом случае для операции поворота *8* просто равно углу поворота.

Далее, ясно, что *если оказывается верным,* что оператор *Q^ в* какой-то момент времени просто меняет фазу состояния (ска­жем, в момент *t*=0), то *это будет верно всегда.* Иначе говоря, если состояние |ψ1> переходит за время *t* в состояние |ψ2>:

*C:\Мои документы\gray.jpg*

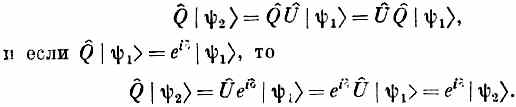
и если симметрия физической картины такова, что

C:\Мои документы\gray.jpg

то верно и то, что

C:\Мои документы\gray.jpg

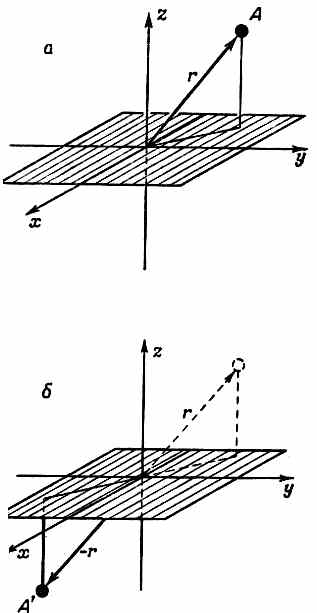
Это ясно, ведь

**

[Верхние равенства следуют из (15.13) и (15.10) для симметричной системы, нижние — из (15.14) и из того, что всякое число, скажем *еiδ,* коммутирует с оператором.]

Итак, при некоторых симметриях то, что верно сначала, вер­но всегда. Но разве это не *закон сохранения?* Да! Он утверждает, что если вы взглянете на исходное состояние и, проделав где-то встороне небольшой подсчет, откроете, что операция, которая является *операцией симметрии для системы,* приводит только к умножению на некоторый фазовый множитель, то вы будете уверены, что это же свойство будет выполнено для конечного состояния — та же операция умножит и конечное состояние на тот же фазовый множитель. Это будет верно всегда, даже если вы ничего не знаете о том внутреннем механизме мира, который изменяет систему от начального состояния к конечному. Даже если вы не позаботились вглядеться в детали того, каким именно способом система переходит от одного состояния к другому, вы все равно имеете право говорить, что если вещь вначале находилась в состоянии с определенным характером симметрии и если гамильтониан этой вещи симметричен отно­сительно этой операции симметрии, тогда тот же характер симметрии останется у состояния на вечные времена. Это основа всех законов сохранения квантовой механики.

Рассмотрим частный пример. Возьмем опять оператор *Р^.* Сперва, правда, немножко изменим определение операции *Р.* Пусть *Р^* будет не просто зеркальным отражением, потому что оно требует определения плоскости, в которой поставлено зер­кало. Существует особый вид отражения, который указания плоскости не требует. Переопределим операцию *Р^* таким обра­зом: сперва вы отражаете в зеркале, находящемся в плоскости z, так что z переходит в -*z, x* остается *х,* а *у* остается *у;* затем вы поворачиваете систему на угол 180° вокруг оси z, так что *х* переходит в -*х,* а *у* в -*у.* Все вместе называется *инверсией,* обращением координат. Каждая точка проецируется *через начало координат* в диаметрально противоположное положение. Все координаты всего на свете меняют знак. Эту операцию мы, как и прежде, будем обозначать символом *Р.* Она изображена на фиг. 15.4 и немного удобнее, чем простая операция отражения, потому что не нужно указывать, в какой координатной плоско­сти происходит отражение, достаточно лишь указать точ­ку, являющуюся центром симметрии.



*Фиг. 15.4. Операция инверсии Р^.* То, *что находится в точке A (х,* у, z), *переходит в точку*

*А' (-х, -у, -z).*

Теперь предположим, что *у sac* есть состояние *|ψ*0>*,* которое при операции инверсии переходит в еiδ|ψ0>, т. е.

C:\Мои документы\gray.jpg

Сделаем теперь новую инверсию. После *двух* инверсий мы вернемся к тому, с чего начали: ничего не изменится. Должно получиться

*C:\Мои документы\gray.jpg*

Но

*C:\Мои документы\gray.jpg*

Отсюда следует, что (е*iδ*)2=1. Значит, *если оператор инверсии является операцией симметрии* для какого-то состояния, то У δ могут быть только две возможности:

е*iδ*=±1,

а это означает, что или

*C:\Мои документы\gray.jpg*

В классической физике, если состояние симметрично отно­сительно инверсии, то эта операция дает опять то же состояние. А в квантовой механике имеются две возможности: получается

либо *то же состояние,* либо *минус то же* состояние. Когда полу­чается *то же* состояние, *Р^*|ψ0>*=*|ψ0>*,* мы говорим, что у со­стояния |ψ0> *четность положительна.* Если знак меняется, так что *Р^*|ψ0>=-|ψ0>, мы говорим, что *четность* состояния *отрицательна.* (Оператор инверсии *Р^* известен также как опе­ратор четности.) Состояние |*I*> иона Н+2 обладает положитель­ной четностью; состояние же |*II*> *—* отрицательной [см. (15.12)]. Бывают, конечно, состояния, не симметричные отно­сительно операции *Р^*;это состояния без определенной четности. Например, в системе Н+2 состояние |*I*> имеет положительную четность, состояние | *II*> *—* отрицательную, а состояние | *1у* определенной четности не имеет.

Когда мы говорим о том, что операция (например, инверсия) была совершена *«над физической системой»,* то это можно пред­ставлять себе двояким образом. Можно считать, что все, что было в точке **r**, физически сдвинулось в обратную точку -**r**; или можно считать, что мы *смотрим* на ту же систему из новой системы отсчета *х', y*', *z*', связанной со старой формулами *х'=-х, у' =-у* и *z*'=-*z*. Точно так же, когда мы говорим о поворотах, то можно либо считать, что мы поворачиваем цели­ком всю физическую систему, либо что поворачиваем систему координат, в которой мы измеряем нашу систему, оставляя последнюю закрепленной в пространстве. Эти две точки зрения по существу равноценны. Они равноценны и при повороте, *только* поворот *системы* на угол θ подобен повороту системы отсчета на *отрицательный* угол —θ. В нашем курсе мы обычно смотрели, что получается, когда берется проекция на новую систему осей. То, что при этом получается, совпадает с тем, что получится, если мы оставим оси прежними и повернем тело на столько же *назад.* Когда вы это делаете, не забудьте поменять [знаки углов](#прим3).

Многие *законы* физики (но не все) не меняются при отраже­нии или инверсии координат. Они *симметричны* по отношению к инверсии. Законы электродинамики, например, не изменяются, если мы меняем *x* на -*х, у* на -*у* и *z* на -*z* во *всех* уравнениях. То же относится и к законам тяжести, и к сильным взаимодей­ствиям ядерной физики. Только у слабых взаимодействий, ответственных за β-распад, нет такой симметрии. [Мы обсуждали это несколько подробнее в гл. 52 (вып. 4).] Но мы сейчас пре­небрежем β-распадом. Тогда в любой физической системе, на которую, как можно думать, β-распад не оказывает заметного влияния (в качестве примера возьмем испускание света атомом), гамильтониан *H*^ и оператор *Р^* будут коммутировать, В этих обстоятельствах верно следующее утверждение. Если четность состояния вначале положительна и вы поинтересуетесь физиче­ской ситуацией через некоторое время, то увидите, что четность останется положительной. Пусть, например, нам известно, что атом перед тем, как испустить фотон, находился в состоянии с положительной четностью. Вы рассматриваете всю эту систему (включая фотон) после испускания; четность опять будет поло­жительна (и точно так же было бы, если бы вы начали с отрица­тельной четности). Этот принцип именуется *сохранением чет­ности.* Вы теперь понимаете, почему слова «сохранение четно­сти» и «симметрия относительно отражений» в квантовой меха­нике тесно переплетены. Хотя до последних лет считалось, что природа всегда сохраняет четность, теперь известно, что это *не так.* Выяснилось, что это неверно, потому что реакция β-pacпада не обладает симметрией относительно инверсии, обнаружен­ной в других законах физики.

Теперь мы можем доказать интересную теорему (справедли­вую до тех пор, пока слабыми взаимодействиями можно прене­брегать): любое состояние определенной энергии, не являющееся вырожденным, обязано обладать определенной четностью. Его четность должна быть либо положительна, либо отрицательна. (Припомните, что нам иногда встречались системы, в которых несколько состояний имели одну и ту же энергию,— такие со­стояния мы называем *вырожденными.* Так вот наша теорема к ним не относится.)

Мы знаем, что если |ψ0> — состояние определенной энергии, то

C:\Мои документы\gray.jpg

где *Е —* просто число, энергия состояния. Если у нас имеется *произвольный* оператор *Q^,* который является оператором сим­метрии для системы, то мы можем доказать, что

C:\Мои документы\gray.jpg

если только |ψ0> — единственное состояние с данной энергией. Рассмотрим новое состояние |ψ0> которое вы получаете после действия *Q^.* Если вся физика симметрична, то |ψ'0> должно иметь ту же энергию, что и |ψ0>. Но мы ведь выбрали случай, когда состояние с такой энергией *только одно,* а именно |ψ0>; значит, |ψ'0> должно быть тем же состоянием, отличаясь разве что фазой. Таково физическое доказательство.

Но то же последует и из нашей математики. Наше определе­ние симметрии —это (15.10) или (15.11), справедливое для лю­бого состояния |ψ>:

C:\Мои документы\gray.jpg

Но сейчас речь идет о состоянии |ψ0>, которое является состоя­нием с определенной энергией, так что *Н^*|ψ0>=*Е*|ψ0>. А раз *Е —* просто число, то оно попросту проходит сквозь *Q^,* и мы имеем

C:\Мои документы\gray.jpg

так что

C:\Мои документы\gray.jpg

Значит, |ψ'0>=*Q*^ lψ0> — тоже состояние *H*^ с определенной энергией и при этом с тем же самым *Е.* Но по нашей гипотезе имеется только одно такое состояние; значит, |ψ0> должно быть равно *ёiδ*|ψ0>.

Все, что мы только что доказали, относится к любому опера­тору *Q^,* лишь бы он был оператором симметрии для физической системы. Поэтому когда в рассмотрение входят только электрические силы и сильные взаимодействия (и нет никакого β-распада), так что симметрия относительно инверсии является вполне допустимым приближением, в этих обстоятельствах *Р^*|ψ>=е*iδ*|ψ>. Но мы видели также, что е*iδ* обязано равняться либо +1, либо -1. Итак, любое состояние с определенной энергией (если оно не вырождено) навсегда снабжено либо положитель­ной, либо отрицательной четностью.

**§ 3. Законы сохранения**

Обратимся теперь к другому интересному примеру операции симметрии — к повороту. Рассмотрим частный случай опера­тора, который поворачивает атомную систему на угол ϕ вокруг оси z. Обозначим этот [оператор R^z(ϕ).](#прим5) Предположим еще, что никаких влияний, выстроенных вдоль осей *х* и *у,* в нашем физи­ческом случае нет. Все электрические или магнитные поля взяты [параллельными оси z](#прим4), так что никаких изменений во *внешних* условиях от поворота всей физической системы вокруг оси *z* не наступит. Например, если имеется атом в пустом простран­стве и мы повернем этот атом вокруг оси *z* на угол ϕ, то получим ту же физическую систему.

Тогда существуют *особые состояния,* обладающие тем свойст­вом, что такая операция создает новое состояние, равное перво­начальному, умноженному на некоторый фазовый множитель. Заметим, что когда это так, то изменение фазы обязано быть всегда пропорционально углу ϕ. Представьте, что вы дважды захотели бы сделать поворот на угол ϕ. Это равносильно тому, что повернуть на угол 2ϕ. Если поворот на угол ϕ имеет своим следствием умножение состояния |ψ0> на фазовый множи­тель *eiδ,* так что

C:\Мои документы\gray.jpg

то два таких поворота, один вслед за другим, привели бы к умножению состояния на множитель (е*iδ*)2=е*i2δ*, так как

C:\Мои документы\gray.jpg

Изменение фазы δ оказывается [пропорциональным ϕ](#прим6). Мы, стало быть, рассматриваем лишь те особые состояния |ψ0>, для которых

R^z(ϕ)|ψ0> =e*imϕ*|ψ0>, (15.22)

где *m —* некоторое вещественное число.

Нам известен также тот примечательный факт, что *если* система симметрична относительно поворота вокруг *z* и *если* исходное состояние обладает тем свойством, что (15.22) окажется выполненным, то и позже у этого состояния сохранится то же свойство. Значит, это число *m* имеет большую важность. Если его значение мы знаем в начале, то мы знаем его и в конце. Это число *m,* которое *сохраняется,* есть *константа движения.* Причи­на, почему мы говорим об *m,* выталкиваем его на первый план, состоит в том, что оно не связано с каким-либо определенным углом ϕ, и еще потому, что у него есть соответствие в классиче­ской механике. В *квантовой* механике мы *выбираем* для *mh* (в состояниях, подобных |ψ0>) *название момент количества движения вокруг оси z.* И тогда мы обнаруживаем, что в пределе больших систем та же величина равняется z-компоненте момента количества движения из классической механики. Значит, если мы имеем состояние, для которого поворот вокруг оси *z* при­водит просто к фазовому множителю *eimϕ,* то перед нами со­стояние с определенным моментом количества движения во­круг этой оси, и момент количества движения сохраняется. Он навсегда остается равным *mh.* Конечно, повороты можно делать вокруг любых осей, и сохранение момента количества движения тоже будет получаться для любых осей. Вы видите, что сохранение момента количества движения связано с тем фактом, что, когда вы поворачиваете систему, вы получаете опять то же состояние, только с новым фазовым множителем.

Сейчас мы покажем вам, насколько обща эта идея. Применим ее к двум другим законам сохранения, по физической идее точно соответствующим сохранению момента количества движения. В классической физике существует также сохранение импульса и сохранение энергии, и интересно, что оба они тоже связаны с некоторыми физическими симметриями. Положим, у нас имеет­ся физическая система — атом, или сложное ядро, или же моле­кула, или что угодно — и если мы возьмем ее и как целое пере­двинем на новое место, то ничего не изменится. Значит, мы имеем гамильтониан с тем свойством, что он в некотором смысле зави­сит от *внутренних координат,* но не зависит от *абсолютного положения* в пространстве. В этих обстоятельствах существует специальная операция симметрии, которая называется простран­ственным переносом. Определим *D^x* (*а*) как операцию смещения на расстояние *а* вдоль оси *х.* Тогда для каждого состояния мы сможем проделать эту операцию и получить новое состояние. И опять здесь возможны весьма специальные состояния, обла­дающие тем свойством, что когда вы их смещаете по оси *х* на *а,* вы получаете то же самое состояние (если не считать фазового множителя). И так же, как делалось выше, можно доказать, что когда так бывает, то фаза пропорциональна *а.* Так что для этих специальных состояний |ψ0> можно писать

C:\Мои документы\gray.jpg

Коэффициент *k,* умноженный на *h*, называется *х-компонентой импульса.* Его называют так потому, что это число, когда система велика, численно совпадает с классическим импульсом *рх.* Общее утверждение таково: если гамильтониан не меняется при сдвиге системы и если вначале состояние характеризуется опре­деленным импульсом в направлении *х,* то импульс в направле­нии *х* останется с течением времени неизменным. Полный им­пульс системы до и после столкновений (или после взрывов или еще чего-нибудь?) будет один и тот же.

Есть и другая операция, которая совершенно аналогична смещению в пространстве: сдвиг во времени. Положим, перед нами физические обстоятельства, когда *ничто внешнее* от вре­мени не зависит, и вот в этих обстоятельствах мы помещаем нечто в некоторый момент времени в данное состояние и пускаем его на произвол судьбы. А в другой раз (в новом опыте) мы то же самое устройство запускаем двумя секундами позже или вообще т секундами позже. И вот если ничего во внешних условиях не зависит от абсолютного времени, то все будет развиваться точно так же, как прежде, и конечное состояние совпадет с прежним конечным состоянием, за исключением того, что за­поздает на время т. В этих обстоятельствах также найдутся осо­бые состояния, у которых развитие во времени обладает той особенностью, что запоздавшее состояние — это попросту ста­рое состояние, умноженное на фазовый множитель. И на этот раз тоже ясно, что для этих особых состояний изменение фазы должно быть пропорционально τ. Можно написать

C:\Мои документы\gray.jpg

Общепринято при определении ω пользоваться знаком минус; при таком соглашении ωh — это *энергия* системы; *она сохра­няется.* Итак, система с определенной энергией — это такая система, которая при сдвиге во времени на τ воспроизводит самое себя, умноженную на e-*iωτ.* (Это как раз то, что мы гово­рили, когда определяли квантовое состояние с определенной энергией, так что все согласуется.) Это означает, что если система находится в состоянии с определенной энергией и если га­мильтониан не зависит от *t,* то независимо от того, что произой­дет дальше, система во все позднейшие времена будет обладать той же энергией.

Теперь вы понимаете, стало быть, какая связь между законами сохранения и симметрией мира. Симметрия по отношению к сдви­гам во времени влечет за собой сохранение энергии; симметрия относительно положения на осях *х, у* или z влечет за собой сохранение соответствующей компоненты импульса. Симметрия относительно поворотов вокруг осей *х, у* и z влечет за собой сохранение *х-, у-* и z-компонент момента количества движения. Симметрия относительно отражений влечет за собой сохранение четности. Симметрия по отношению к перестановке двух элек­тронов влечет за собой сохранение чего-то, чему не придумано еще названия, и т. д. Часть этих принципов имеет классические аналоги, а часть — нет. В квантовой механике есть больше законов сохранения, чем это нужно для классической механики или по крайней мере чем обыкновенно в ней в ходу.

Чтобы вы смогли разобраться в других книгах по кванто­вой механике, мы сделаем небольшую техническую ремарку и познакомим вас с одним общепринятым обозначением. Операция сдвига по времени — это как раз та самая операция *U^,* о кото­рой мы как-то говорили:

C:\Мои документы\gray.jpg

Многие предпочитают язык *бесконечно малых* сдвигов по времени или бесконечно малых перемещений в пространстве или пово­ротов на бесконечно малые углы. Поскольку всякое конечное смещение или угол можно постепенно накопить последователь­ными бесконечно малыми смещениями или поворотами, то часто легче проанализировать сначала этот бесконечно малый случай. Оператор бесконечно малого сдвига Δ*t* во времени есть (по определению гл. 6, вып. 8)

C:\Мои документы\gray.jpg

Тогда *Н* аналогично классической величине, которую мы име­нуем энергией, потому что если *Н^*|ψ> оказывается равным

постоянной, умноженной на |ψ>, а именно если *Н^*|ψ>=*E*|ψ>,

то эта постоянная есть энергия системы.

То же самое проделывается и с другими операциями. Если мы делаем легкое смещение по *х,* скажем на Δ*x*, то состояние

|ψ>, *вообще говоря,* перейдет в некоторое новое состояние

|ψ'>. Мы можем написать

C:\Мои документы\gray.jpg

потому что, когда Δ*x* стремится к нулю, |ψ'> обязано обратиться опять в |ψ>, или, что то же самое, *D^x* (0)=1, а для малых Δ*x* отклонение *D^x* (Δ*x*) от единицы должно быть пропорционально Δ*x*. Оператор *рх,* определенный таким путем, называется оператором импульса (естественно, для *x*-компоненты).

По тем же причинам для малых поворотов обычно пишут

C:\Мои документы\gray.jpg

и называют *J*^z оператором *z*-компоненты момента количества движения. Для тех особых состояний, для которых *R^z* (ϕ)|ψ0>=еimϕ |ψ0>, можно для каждого малого угла, скажем Δϕ, разложить правую часть до членов первого порядка по Δϕ и получить

C:\Мои документы\gray.jpg

Сравнивая это с определением *J^z* по формуле (15.28), приходим к

C:\Мои документы\gray.jpg

Иначе говоря, если вы действуете оператором *J^z* на состояние с *определенным моментом количества движения* вокруг оси z, то получаете *mh,* умноженное на это состояние, где *mh—*коли­чество z-компоненты момента количества движения. Все совер­шенно аналогично тому, как действие *Н^* на состояние с опреде­ленной энергией дает *Е*|ψ>.

Теперь хотелось бы перейти к некоторым приложениям идеи о сохранении момента количества движения, чтобы показать вам ее в действии. Дело в том, что в действительности все это очень просто. О том, что момент количества движения сохраняется, вы знали и раньше. Единственное, что вам нужно запомнить из этой главы, это что если у состояния |ψ0> есть такое свойство, что при повороте на угол ϕ вокруг оси z оно превращается в е*imϕ*|ψ0>, то z-компонента момента количества движения равна *mh.* Этих знаний достаточно, чтобы получить уйму инте­ресных вещей.

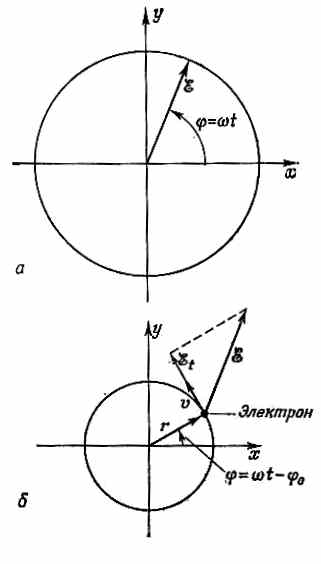
**§ 4. Поляризованный свет**

Прежде всего необходимо проверить одну идею. В гл. 9, § 4 (вып. 8), мы показали, что когда состояние правополяризованного по кругу света наблюдается из системы, повернутой на угол ϕ [вокруг оси z](#прим8), то оно оказывается умноженным на е*iϕ*. Не означает ли это, что фотоны правополяризованного по кругу света несут момент количества движения вдоль оси z, [равный единице](#прим7)?

*Да, так оно и есть.* Это означает еще, что когда у нас имеется пучок света, содержащий множество фотонов, поголовно оди­наково поляризованных по кругу (как бывает в классических пучках), то он будет нести с собой какой-то момент количества движения. Если полная энергия, уносимая пучком за какое-то время, есть *W*, то в нем имеется *N*=*W*/hω фотонов. Каждый несет по моменту *h,* так что полный момент количества движения равен

*Jz=Nh=W/ω.* (15.30)

Можно ли и в классике доказать, что свет, правополяризованный по кругу, несет с собой энергию и момент количества движения в пропорции *W* к ω? Ведь если все правильно, это было бы классическое утверждение — случай, когда можно перейти от квантов к классике. Надо проверить, подтверждается ли это классической физикой. Тогда станет ясно, имеем ли мы право назвать *т* моментом количества движения. Припомним, чем в классическом смысле является правополяризованный свет. Он описывается электрическим полем с колеблющейся *x*-компонентой и колеблющейся *y*-компонентой, сдвинутыми по фазе на 90°, так что суммарный вектор **ξ** электриче­ского поля бежит по кругу (фиг. 15.5, *а).*



*Фиг. I5.5. Электрическое поле* ***ξ*** *в поляризованной по кругу све­товой волне (а) и вращение элек­трона, приводимого в движение поляризованным по кругу светом (б).* .

Теперь положим, что мы осветили таким светом стенку, способную поглотить его (или по крайней мере часть его), и рассмотрим один из атомов стенки, опираясь на классические представления. Мы часто представляли движение электрона в атоме в виде гармонического осциллятора, который приводится в дейст­вие внешним электрическим полем. Предположим, что атом изотропен, так что с равным успехом колеблется как в направлении *х,* так и в направлении *у.* Далее, у све­та, поляризованного по кру­гу, смещения по *х* и по *у* одинаковы, хотя и отстают друг от друга на 90°. В итоге электрон будет двигаться по кругу (фиг. 15.5, *б).* Он сместит­ся из положения равновесия в начале координат на величину г и начнет ходить по кругу, как-то отставая по фазе от вектора **ξ**. Связь между **ξ** и r может быть такая, как пока­зано на фиг. 15.5, *б.* Электрическое поле с течением времени поворачивается, но с такой же частотой поворачивается и сме­щение, так что относительная ориентация остается той же. Посмотрим теперь, какая работа производится над электроном. Скорость, с какой электрону подается энергия, равна его ско­рости *v,* умноженной на компоненту ξt, параллельную этой

скорости:

C:\Мои документы\gray.jpg

Но вы не можете не заметить, что у электрона в это время непре­рывно увеличивается и момент количества движения, потому что он все время испытывает действие момента, вращающего его вок­руг начала координат. Вращательный момент равен ξt*r*, и он обязан равняться скорости изменения момента количества движения *dJz/dt:*

C:\Мои документы\gray.jpg

Вспоминая, что *v=ωr*, имеем

C:\Мои документы\gray.jpg

Следовательно, если проинтегрировать поглощаемый пол­ный момент количества движения, то он окажется пропорцио­нальным полной энергии, с коэффициентом пропорциональности 1/ω, что согласуется с (15.30). Свет действительно несет с собой момент количества движения — одну единицу (X*h*), когда он правополяризован по кругу вдоль оси z, и минус одну единицу, когда левополяризован.

Теперь зададим следующий вопрос: если свет линейно поля­ризован в направлении *х,* то чему равен момент количества движения? Свет, поляризованный в направлении *х,* может быть представлен суперпозицией право- и левополяризованного света. Поэтому имеется некоторая амплитуда того, что момент количества движения равен +*h*, и некоторая амплитуда того, что момент равен -*h*, так что *определенного* момента количества движения у него нет, а есть амплитуда появиться с +*h*, и такая же появиться с -*h.* Интерференция этих двух амплитуд создает линейную поляризацию, обладающую *равной* вероятностью оказаться с плюс или с минус одной единичкой момента количе­ства движения. Макроскопические измерения, проведенные над пучком линейно поляризованного света, покажут, что он несет нулевой момент количества движения, потому что среди боль­шого числа фотонов, несущих противоположные количества момента, окажется поровну правых и левых, и средний момент количества движения будет равен нулю. И в классической тео­рии вы не обнаружите никакого момента количества движения, разве что где-то окажутся следы какой-то круговой поляриза­ции.

Мы говорили, что частица со спином 1 может иметь три зна­чения *Jz*:+1, 0, -1 (те три состояния, которые нам встрети­лись в опыте Штерна — Герлаха).

Но у света свой нрав: у него только два состояния. Состоя­ния с нулем у него нет. Эта странная потеря связана с тем, что свет не может стоять на месте. У покоящейся частицы со спином *j* имеются 2*j*+1 возможных состояния со значениями *jz,* идущими с шагом 1 от -*j* до +*j*. Но оказывается, что если что-то имеет спин *j*, а масса этого чего-то равна нулю, то у него могут быть только состояния с компонентами +*j* и -*j* вдоль направ­ления движения. Например, у света не три состояния, а два, хотя фотон — это объект со спином 1. Как же это согласуется с нашими прежними доказательствами, опирающимися на то, что происходит при поворотах в пространстве, доказательства­ми того, что для частиц со спином 1 необходима тройка состоя­ний? Покоящуюся частицу можно поворачивать вокруг любой оси, не меняя состояния ее момента. Частицы же с нулевой массой покоя (например, фотоны или нейтрино) не могут на­ходиться в покое; только повороты вокруг оси, указывающей направление движения, не изменят состояния момента. А пово­ротов вокруг одной оси не хватает на то, чтобы доказать, что нужны обязательно три состояния, если дано, что одно из них при поворотах на угол ϕ [меняется, как](#прим9) е*iϕ*.

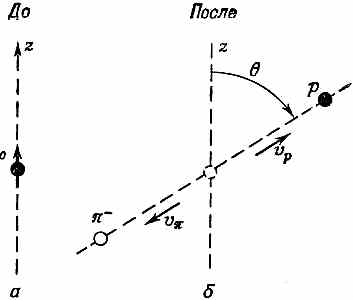
Еще одно замечание в сторону. Вообще-то частицы с нулевой массой покоя могут обойтись *только одним* из двух спиновых со­стояний (+*j*, -*j*) относительно линии движения. У нейтрино (частиц со спином 1/2) в природе существуют только состояния с компонентой момента количества движения -*h*/2, *обратной* направлению движения (а у антинейтрино — только с компо­нентой по направлению движения, +*h*/2). Когда же система обладает симметрией инверсии (так что четность сохраняется), требуются уже обе компоненты +*j* и -*j*. Примером является свет.

**§ 5. Распад Λ0**

Теперь приведем пример того, как теорема о сохранении мо­мента количества движения применяется в чисто квантовофизических задачах. Рассмотрим распад лямбда-частицы (Λ0), кото­рая расщепляется на протон и π--мезон посредством слабого взаимодействия:

C:\Мои документы\gray.jpg

Пусть нам известно, что спин у пиона равен нулю, у протона — половине, а у Λ0 тоже половине. Мы хотели бы решить следую­щую задачу: положим, что Λ0 рождена таким образом, что ока­залась полностью поляризованной; это значит, что ее спин направлен, скажем, вверх по отношению к подходящим образом выбранной оси z (фиг. 15.6, а).



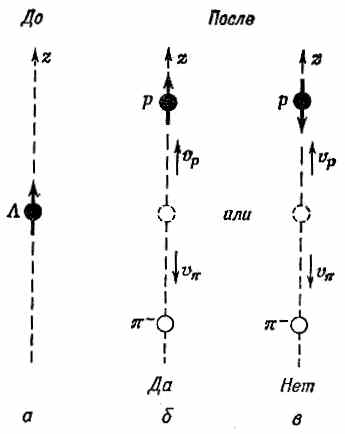
*Фиг. 15.6. Λ0-частица со спином, направленным вверх, распадается на протон и пион (в системе центра масс).*

*Какова вероятность того, что протон вылетит под углом θ?*

Вопрос заключается в том, с какой вероятностью она распадется так, что протон вылетит под углом θ к оси z (фиг. 15.6, б). Иными словами, каково угло­вое распределение распадов? Мы будем рассматривать распад в системе координат, где Λ0 покоится, измеряя углы в системе покоя Λ0; если нужно, их всегда можно перевести в другую

систему.

Начнем с рассмотрения того частного случая, когда протон испускается в небольшой телесный угол ΔΩ близ оси z (фиг. 15.7).



*Фиг. 15.7. Две возможности распада частицы Λ0* *со спином, направленным вверх, если про­тон движется по оси* +z.

*Момент сохраняется только при схеме распада (б).*

До распада спин Λ0 был направлен вверх (фиг. 15.7, *а).* Через мгновение (по причинам, по сей день неизвестным, известно только, что они связаны со слабыми распадами) Λ0 взрывается, образуя протон и пион. Пусть протон летит вверх по оси + z. Тогда пиону из-за сохранения импульса придется направиться вниз. Поскольку протон — это частица со спином 1/2, то его спин обязан быть направлен либо вверх, либо вниз,— в принципе имеются две возможности, показанные на фиг. 15.7, *б* и *в*. Со­хранение момента количества движения требует, однако, чтобы спин протона был направлен только вверх. Легче всего понять это из следующих рассуждений. Частица, движущаяся вдоль оси *z,* никак не может приобрести за счет своего движения момента вокруг этой оси, поэтому в *Jz* могут дать вклад только спины. Спиновый момент количества движения вокруг оси *z* до распада был равен +*h*/2; значит, и после он будет равен + *h*/2*.* Можно сказать, что из-за того, что у пиона нет спина, спин протона должен смотреть вверх.

Если вас тревожит, что такого рода рассуждения могут в квантовой механике оказаться неправильными, стоит потратить минутку, чтобы показать, что и по квантовой механике все обстоит так же. Начальное (дораспадное) состояние, которое мы обозначим |Λ0, спин по + z), обладает тем свойством, что если его повернуть вокруг оси z на угол ϕ, то вектор состояния умножается на фазовый множитель e*iϕ/2*. (В повернутой системе вектор состояния равен eitf/2|Λ0, спин но + z>.) Именно это и имеют в виду, говоря о спине вверх у частицы со спином 1/2.

Поскольку поведение природы не зависит от нашего выбора осей, то конечное состояние системы «протон плюс пион» должно обладать тем же свойством. Конечное состояние мы можем, на­пример, записать в виде

1 протон летит по +z, спин по +z; пион летит по -*z*>.

Но движение пиона на самом деле не нужно оговаривать, потому что в выбранной нами системе пион всегда движется противоположно протону; наше описание конечного состояния можно упростить до

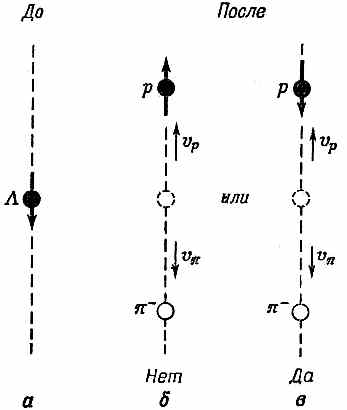
1 протон летит по + z, спин по + z>.

Так что же случится с этим состоянием, если мы повернем си­стему координат вокруг оси *z* на угол ϕ?

Раз протон и пион движутся вдоль оси *z,* их движение пово­ротом не изменишь. (Вот почему мы и выбрали этот частный случай; иначе бы наше рассуждение не прошло.) Значит, с пио­ном ничего не случится, потому что спин его равен нулю. У про­тона, однако, спин равен 1/2. Если его спин направлен вверх, он в ответ на поворот изменит фазовый множитель в eiϕ/2 раз. (А если бы спин его был направлен вниз, то изменение фазы стало бы e-iϕ/2.) Но если момент количества движения обязан сохра­няться (а это так, ибо в гамильтониане нет факторов, завися­щих от внешних воздействий), то изменение фазы из-за поворота должно быть до распада и после распада одно и то же. Итак, единственная возможность состоит в том, что спин протона будет направлен вверх. Если протон двинулся вверх, то и спин его должен быть направлен вверх.

Мы, следовательно, заключаем, что сохранение момен­та количества движения разрешает процесс, показанный на фиг. 15.7, *б,* но не разрешает процесса, показанного на фиг. 15.7, *в.* А раз мы знаем, что распад все же про­исходит, то, значит, имеется некоторая амплитуда для процесса, показанного на фиг. 15.7, *б,* когда протон летит вверх и спин его при этом тоже смотрит вверх. И мы обозначим буквой *а* амплитуду того, что в бесконечно малый промежуток времени произойдет [такой распад](#прим10).

Теперь посмотрим, что было бы, если бы спин Λ0 вначале был направлен вниз. Опять рассматриваем распады, в кото­рых протон взлетает вверх по оси z, как показано на фиг. 15.8.



*Фиг. 15.8. Распад вдоль оси z* *для Λ0* *со спином, направлен­ным вниз.*

Вам, конечно, теперь ясно, что в этом случае спин протона направлен вниз (если только момент коли­чества движения сохра­няется). Обозначим ампли­туду такого распада буквой *b.*

Об амплитудах *а* и *b* мы ничего больше сказать не сможем. Они зависят от внутренней механики час­тицы Λ0 и от слабых распадов, и никто пока не знает, как их подсчитывать. Их приходится полу­чать из опыта. Но, зная только эти две амплитуды, мы *можем* узнать об угловом распределении распадов все, что захотим. Надо только всегда тщательно и полностью определять те состояния, о которых идет речь.

Мы хотим знать вероят­ность того, что протон вы­летит под углом θ к оси *z* (в некоторый узкий телесный угол θΩ), как показано на фиг. 15.6. Проведем новую ось *z* в этом направлении и обозначим ее z'! Как анализировать, что происходит вдоль этой оси, мы знаем. По отношению к ней спин Л° уже не направлен вверх, а имеет какую-то амплитуду того, что он окажется направленным вверх и какую-то — вниз. Все это мы уже подсчитывали в гл. 4, а потом опять в гл. 8 [уравнение (8.30)] (вып. 8). Амплитуда того, что спин будет направлен вверх, есть cosθ/2, а амплитуда того, что спин будет смотреть вниз, [есть -sinθ/2](#прим11). Когда спин Λ0 направлен вверх по оси z', она испустит протон в направлении *z* с амплиту­дой *а.* Значит, амплитуда того, что по направлению *z* пройдет протон, держа свой спин вверх, равна

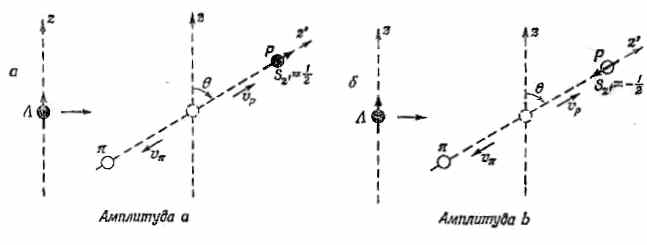
*a*cosθ/2. (15.33)

Точно так же амплитуда того, что вдоль положительной оси *z* пройдет протон, направив свой спин вниз, равна

-*b*sinθ/2. (15.34)

Те два процесса, к которым относятся эти амплитуды, показаны

на фиг. 15.9.



*Фиг*. *15.9. Два возможных состояния распада Λ0*.

Теперь зададим такой немудреный вопрос. Пусть мы соби­раемся регистрировать протоны, вылетающие под углом θ, не интересуясь их спином. Два спиновых состояния (вверх и вниз по оси z') различимы, даже если бы мы того и не хотели. Значит, чтобы получить вероятность, надо амплитуды возвысить в квад­рат и сложить. Вероятность *f*(θ) обнаружить протон в неболь­шом телесном угле θΩ при θ равна

C:\Мои документы\gray.jpg

Вспоминая, что C:\Мои документы\gray.jpg

запишем *f*(θ) так:

C:\Мои документы\gray.jpg

Угловое распределение имеет вид

C:\Мои документы\gray.jpg

Одна часть вероятности не зависит от θ, а другая зависит от cosθ линейно. Из измерений углового распределения мы можем получить α и β, а значит, и |*а*| *,* и |*b*|*.*

Можно получить ответ и на многие другие вопросы. Может быть, вас интересуют лишь те протоны, спин которых направлен вверх относительно *старой* оси z? Каждый член в (15.33) и (15.34) даст амплитуду того, что спин протона окажется направ­ленным вверх или вниз по отношению к оси *z*' (|+*z*'> и |-*z*'>). А состояние, когда спин направлен вверх относитель­но старой оси, | + z), можно выразить через два базисных со­стояния | + *z'*>и |-z'>. Можно тогда взять две амплитуды (15.33) и (15.34) с надлежащими коэффициентами (cosθ/2 и -sinθ/2) и получить полную амплитуду

C:\Мои документы\gray.jpg

Ее квадрат даст вероятность того, что протон вылетит под углом θ со спином, направленным туда же, куда направлен спин Λ0 (вверх по оси *z*).

Если бы четность сохранялась, можно было бы сделать еще одно утверждение. Распад на фиг. 15.8 — это просто зеркальное отражение, скажем в плоскости *yz,* [распада с фиг. 15.7](#прим12). Если бы четность сохранялась, *b* равнялось бы либо *a*, либо -*а*. Тогда коэффициента в (15.37) был бы равен нулю и распад оди­наково часто происходил бы во всех направлениях.

Результаты опытов говорят, однако, что при распаде асим­метрия *существует.* Измеренное угловое распределение дейст­вительно, как мы предсказали, меняется по закону cosθ, а не по закону cos2θ или по другой степени. Из этого углового распределения, стало быть, следует, что спин Λ0 равен 1/2*.* Кроме того, мы видим, что четность не сохраняется. Действи­тельно, коэффициента на опыте найден равным -0,62±0,05, так что *b* примерно вдвое больше *а.* Отсутствие симметрии от­носительно отражений совершенно очевидно.

Вы видите, как много можно вывести из сохранения момента количества движения. Еще некоторые примеры будут приведены в следующей главе.

• • •

*Замечание после лекции.* Под амплитудой *а* здесь мы подразумевали амплитуду того, что состояние

| протон летит по + z, спин по + z> обра­зовано за бесконечно малое время *dt* из состояния |Λ, спин по + z>, или, иными словами, что

<протон летит по +*z*, спин по +z|*H*|Λ, спин по + z>= *iha,* (15.38)

где *H* — гамильтониан всего мира или по крайней мере той его части, которая ответственна за Λ-распад. Сохранение момента количества дви­жения означает, что у гамильтониана должно быть такое свойство:

<протон летит по +z, спин по -z|*H*|Λ, спин по +z>=0. (15.39)

Под амплитудой *b* подразумевается, что

<протон летит по + z, спин по —z|*H*|Λ, спин по -z>=*ihb.* (15.40)

Сохранение момента количества движения предполагает, что

<протон летит по + z, спин по +*z*|*H*|Λ*,* спин по -z>=0. (15.41)

Если вам не ясно, как написаны амплитуды (15.33) и (15.34), можно их записать в более математической форме. Когда мы писали (15.33), нам нужна была амплитуда того, что Л со спином, направленным по +z, распадается на протон, движущийся вдоль направления +*z'* и обладаю­щий спином, направленным тоже по +*z*', т. е.

<протон летит по + *z',* спин по +*z*'|*H*|Λ, спин по +z>. (15.42)

По общим теоремам квантовой механики эту амплитуду можно записать так:

2S<протон летит по + z', спин по +z'|H|Λ, *i*><Λ, *i*|Λ, спин по +z>,

(15.43)

где суммирование проводится но базисным состояниям |Λ, *i*> покоящейся Λ-частицы. Поскольку спин Λ-частнцы равен 1/2,таких состояний два, л каком бы базисе мы ни работали. Если в качестве базисных мы выберем состояния со спином, направленным вверх и вниз *по отношению к оси* z'(|+z'>, |-z'>), то амплитуда (15.43) будет равна сумме

<протон летит по +z', спин по +z'|*H*|Λ, +z'> <Λ, +z'|Λ, +z>+ +<протон летит по +z', спин по +z'|*H*|Λ,-z'><Λ,-z|Λ, +z>. (15.44).

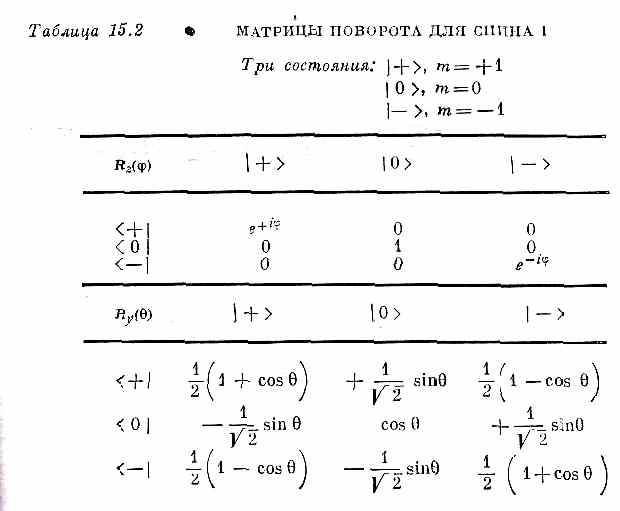
Первый множитель в первом слагаемом равен *а* [из (15.38)], а первый множитель во втором слагаемом равен нулю — из формулы (15.41), в свою очередь следующей из сохранения момента количества движения. Второй множитель <Λ, +z'|Λ, +z> из первого слагаемого — это как раз амплитуда того, что частица со спином 1/2, направленным вверх по одной оси, будет также обладать спином, направленным вверх по другой оси, повернутой относительно первой на угол θ . Такая амплитуда равна cosθ/2 [см. табл. 4.2 (вып. 8)]. Так что (15.44) равно просто *а* созθ/2, как и было написано в (15.33). Амплитуда (15.34) следует из таких же рассуж­дений для Λ-частицы со спином, направленным вниз.

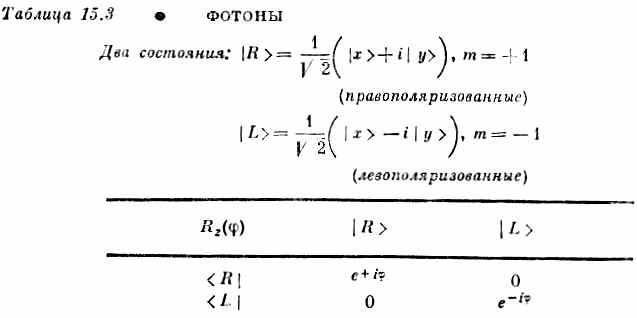
• • •

**§ 6. Сводка матриц поворота**

Теперь мы хотим собрать воедино все, что мы узнали о пово­ротах частиц со спином 1/2 и спином 1; это будет удобно для дальнейшего. Ниже вы найдете таблицы двух матриц поворота *Rz* (ϕ) и *Ry*(θ) для частиц со спином 1/2, для частиц со спином 1 и для фотонов (частиц со спином 1 и нулевой массой).







Для каждого из них приведены элементы матрицы <*j*|*R*|*i*> по­воротов вокруг оси 2 или оси *y*. Они, конечно, в точности экви­валентны амплитудам типа <+*Т*|0*S*>, которыми мы поль­зовались в предыдущих главах. Под *Rz* (ϕ) мы понимаем, что берется проекция состояния на новую систему координат, по­вернутую на угол ϕ вокруг оси z, причем для определения направ­ления поворота всегда применяется правило правой руки; *RV*(θ) означает, что оси координат повернуты на угол 9 вокруг оси *у.* Зная эти два поворота, вы запросто сможете рассчитать любой поворот. Как обычно, матричный элемент пишется так, что со­стояние *слева —* это базисное состояние *новой* (повернутой) системы, а состояние *справа —* это базисное состояние *старой* (неповернутой) системы. Клетки таблицы можно истолковывать по-разному. К примеру, клетка *eiϕ/2* в табл. 15.1 означает, что матричный элемент < — |*R*|—> = е-iϕ/2. Но это означает также, что *R^*| *—*>=е-iϕ/2| — } или что

<— | *R^=*<— |e-iϕ. Это все одно и то же.

\* Вспомните, что спин — это аксиальный вектор и при отражении он переворачивается.

***\* Мы провели ось z' в плоскости xz и используем матричные элементы для Ry (θ). То же получилось бы и при другом выборе осей.***

***\* Мы сейчас предполагаем, что механизм квантовой механики вам настолько знаком, что обо всем можно говорить на чисто физическом языке, не тратя времени на расписывание всех математических деталей. Но если то, что мы здесь говорим, вам не очень ясно, то обратитесь к концу этого параграфа, где приведены некоторые недостающие детали.***

***\* Мы попытались на худой конец доказать, что компонента момента количества движения вдоль направления движения у частицы с нулевой массой должна быть, например, кратной h/2, а не h/3. Но даже приведя в действие всевозможные свойства преобразований Лоренца (и многое дру­гое), мы с этим не справились. Может, этой не так. Надо было бы потол­ковать об этом с профессором Вигнером, который знает все о таких вещах.***

***\* Прошу прощения! Этот угол имеет обратный знак по отношению к использовавшемуся в гл. 9, § 4.***

***\*\* Как правило, момент количества движения атомной системы весьма удобно измерять в единицах h. Тогда можно говорить, что частица со спином 1/2 обладает по отношению к любой оси моментом количества движения ±1/2. И вообще, что z-компонента момента количества движе­ния есть т. Не приходится все время повторять h.***

***\* Для большей строгости все эти рассуждения нужно было бы про­вести для малых поворотов ε. Раз каждый угол ϕ представляет собой сумму некоторого числа n таких поворотов, ϕ=nε, то R^z (ϕ)=[Rz (ε)]n, и общее изменение фазы в n раз превосходит изменение для малого угла 8 и поэтому пропорционально ϕ.***

***\* Точнее, мы определим R^z(ϕ) как поворот физической системы на -ϕ вокруг оси z; это то же самое, что повернуть систему координат на +ϕ.***

***\*\* Мы всегда вправе выбрать ось z вдоль направления поля при усло­вии, конечно, что его направление не меняется и что больше полей нет.***

***\* В других книгах вы можете встретить формулы с другими знаками; вероятнее всего, в них используются углы, определенные по-иному.***

***\* Кстати, вы можете доказать, что Q^ — это обязательно унитарный оператор, т. е. если он действует на |ψ>, приводя к |ψ>, умноженному на некоторое число, то это число должно иметь вид еiδ, где δ — веществен­но. Это мелкое замечание, а доказательство основано на следующем наб­людении. Всякая операция наподобие отражения или поворота не приво­дит к потере каких-либо частиц, так что нормировки |ψ'> и |ψ> должны совпадать; отличаться они вправе только на множитель с чисто вещест­венной фазой в показателе.***

Литература: А. Р. Эдмондс, Угловые мо­менты в квантовой механике, в кн. «Деформация атомных ядер», ИЛ, 1958.

***Глава 16***

**МОМЕНТ КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ**

[**§ 1. Электрическое** **ди****польное излучение**](#a1)

[**§ 2. Рассея****ние света**](#a2)

[**§ 3. Аннигиля****ция позитрония**](#a3)

[**§ 4. Матрица пово­рот****а для про­извольного спина**](#a4)

[**§ 5. Измерения ядер****ного спина**](#a5)

[**§ 6. Сложение моментов коли****чества движения**](#a6)

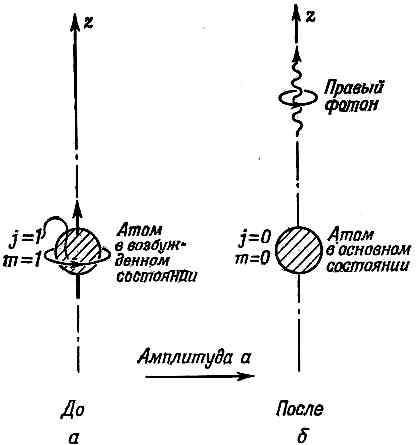
[**Добавление 1. Вывод матрицы п****оворота**](#доб1)

[**Добавление 2. Со****хранение** **четности при испускании фотона**](#доб2)

**§ 1. Электрическое дипольное излучение**

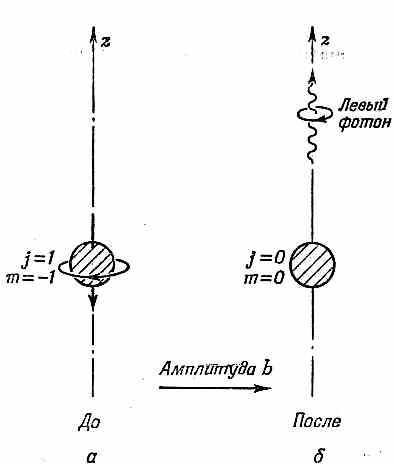
В предыдущей главе мы развили представле­ния о сохранении момента количества движения в квантовой механике и показали, как ими можно воспользоваться для предсказания угло­вого распределения протонов при распаде Λ0-частицы. Теперь мы хотим добавить еще несколько иллюстраций тех следствий, кото­рые вытекают из сохранения момента количест­ва движения в атомных системах. Первым при­мером послужит излучение света атомом. Сохра­нение момента количества движения (наряду с другими обстоятельствами) определит поляри­зацию и угловое распределение испускаемых фотонов.

Пусть имеется атом в возбужденном со­стоянии с определенным моментом количества движения, скажем со спином, равным 1; он, излучая фотон, переходит к состоянию с мо­ментом нуль при более низкой энергии. Задача в том, чтобы представить угловое распределе­ние и поляризацию фотонов. (Она очень похожа на задачу о распаде Λ0-частицы, но только те­перь спин равен не 1/2, a 1.) Раз у возбужденного состояния спин равен единице, то для z-компоненты момента имеются три возможности. Зна­чение *т* может быть или +1, или 0, или -1. Возьмем для примера *m*=+1. (Если мы раз­беремся в этом примере, то справимся и с други­ми.) Предположим, что момент количества движения атома направлен по оси +z (фиг. 16.1, *а),* и спросим, какова амплитуда того, что он излучит вверх по оси гправополяризованный по кругу свет, так что в результате его момент станет равным нулю (фиг. 16.1, *б).*



*Фиг. 16.1. Атом с т* = *+1 излучает вдоль оси* +z *правый фотон.*

Ответа на этот вопрос мы не знаем. Но зато мы знаем, что правополяризованный по кругу свет уносит вдоль направления своего распространения одну единицу мо­мента количества движения. Значит, после излучения фотона положение станет таким, как показано на фиг. 16.1, б, т. е. атом остался с нулевым моментом относительно оси z, поскольку мы предположили, что низшее состояние атома имеет спин нуль. Обозначим амплитуду такого события буквой *а.* Точнее, *а* будет обозначать амплитуду излучения фотона в некоторый узкий телесный угол ΔΩ, окружающий ось *z,* за время *dt.* За­метьте, что амплитуда излучения левого фотона в том же на­правлении равна нулю. У такого фотона момент относительно оси *z* был бы равен -1, а так как у атома он равен нулю, то и в сумме получилось бы -1, так что момент не сохранился бы. Точно так же, если спин атома вначале направлен вниз (-1 вдоль оси z), то он может излучать в направлении оси +*z* только левые фотоны (фиг. 16.2).

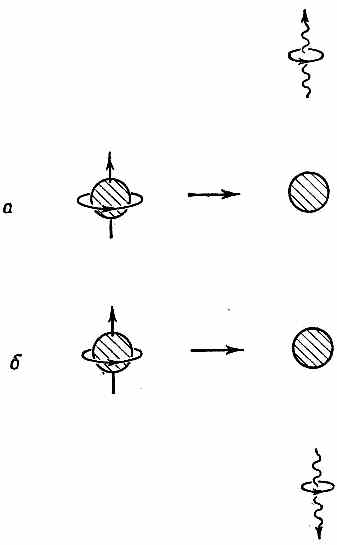


*Фиг. 16.2. Атом с m*=-*1 излучает вдоль оси z левый фотон.*

Амплитуду такого события обозначим буквой *b* (снова имея в виду амплитуду излучения фотона в некоторый узкий телесный угол ΔΩ). С другой стороны, если атом находится в состоянии с *m*=0, он вообще не сможет испустить фотон в направлении +z, потому что у фотона момент количества движения относительно его направления распространения может быть только +1 или -1.

Далее, можно показать, что *b* и *а* связаны. Проделаем над ; системой, изображенной на фиг. 16.1, преобразование инверсии. Это значит, что мы должны представить себе, как будет выглядеть система, если мы каждую ее часть передвинем в соответст­вующую точку с другой стороны от начала координат. Но это *не значит,* что следует отражать и векторы момента количест­ва движения, ведь они — искусственные образования. Нужно другое — нужно обратить истинный характер движения, соот­ветствующего такому моменту количества движения.

На фиг. 16.3, *а* мы показали, как выглядит процесс, изобра­женный на фиг. 16.1, до и после инверсии относительно центра атома.



Фиг, 16.3. Если процесс (а) преобразовать путем инверсии относительно центра атома, он станет выглядеть, как (б).

Заметьте, что направление вращения атома [не изменилось](#прим1). В обращенной системе (фиг. 16.3, б) получается атом с *m=*+1, излучающий вниз левый фотон.

Если мы теперь повернем систему, изображенную на фиг. 16.3, *б,* на 180° вокруг оси *х* и *у,* она совпадет с фиг. 16.2. Сочетание инверсии и поворота превращает второй процесс в первый. Пользуясь табл. 15.2 (стр. 129), мы видим, что поворот на 180° вокруг оси *у* как раз перево­дит состояние с *m*=-1 в состояние с *m*=+1, так что амплитуда *b* должна быть равна амплитуде а, *если не считать возмож­ной перемены знака при инверсии.* А перемена зна­ка при инверсии зависит от четностей начального и конечного состояний атома.

В атомных процессах четность сохраняется, так что четность всей системы до и после излучения фотона должна быть одной и той же. Что на самом деле произойдет, зависит от того, положительны или отрицательны четности начального и конечного состоя­ний атома — в разных случаях угловое распределение из­лучения будет различным. Возьмем обычный случай *отрица­тельной* четности начального состояния атома и *положительной* четности конечного; он даст так называемое «электрическое дипольное излучение». (Если начальное и конечное состояния об­ладают одинаковой четностью, то говорят, что происходит «маг­нитное дипольное излучение», напоминающее по характеру излучение витка с переменным током.) Если четность начально­го состояния отрицательна, его амплитуда при инверсии, пере­водящей систему из а в б на фиг. 16.3, меняет знак. Конечное состояние атома имеет положительную четность, так что его амплитуда при инверсии знака не меняет. Если в реакции сохраняется четность, то амплитуда *b* должна быть равна *а* во величине, но противоположна по знаку.

Мы приходим к заключению, что если амплитуда того, что состояние *m*=+1 излучит фотон вперед, равна а, то для рас­сматриваемых четностей начального и конечного состояний амплитуда того, что состояние *m*=-1 излучит вперед [ле­вый фотон](#прим2), равна -*а.*

Теперь у нас есть все, чтобы найти амплитуду того, что фо­тон будет испущен под углом 0 к оси *z.* Пусть вначале атом поля­ризован так, что *m*=+1. Это состояние мы можем разложить на состояния с *т =* +1, 0, -1 относительно новой оси z', про­веденной в направлении испускания фотона. Амплитуды этих трех состояний — как раз те, которые были приведены в ниж­ней половине табл. 15.2 (стр. 129). Амплитуда того, что правый фотон испускается в направлении 0, равна тогда произведению *а* на амплитуду того, что в этом направлении будет *m=*+1, а именно

C:\Мои документы\gray.jpg

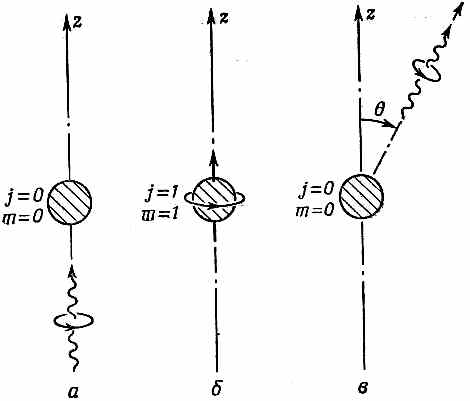
Амплитуда того, что в том же направлении будет испущен ле­вый фотон, равна произведению -*а* на амплитуду того, что в новом направлении будет *m*=-1. Из табл. 15.2 следует

C:\Мои документы\gray.jpg

Если вас интересуют другие поляризации, то их амплитуды вы получите из суперпозиции этих двух амплитуд. Чтобы получить интенсивность любой компоненты как функцию угла, вам при­дется, конечно, взять квадрат модуля амплитуд.

**§ 2. Рассеяние света**

Воспользуемся этими результатами, чтобы решить немного более сложную задачу, но зато и более близкую к реальности. Предположим, что те же атомы находятся в своем основном со­стоянии (*j*=0) и *рассеивают* падающий на них пучок света. Пусть свет первоначально распространяется в направлении + *z,* так что фотоны падают на атом *из* направления -*z,* как показано на фиг. 16.4, *а.*



*Фиг. 16.4. Рассеяние света атомом, рас­сматриваемое как процесс, состоящий из двух шагов.*

Рассеяние света мы можем рассматри­вать как процесс, состоящий из двух шагов: фотон поглощается, а затем вновь излучается. Если мы начнем с правого фотона (фиг. 16.4, *а*) и если момент количества движения сохраняется, то после поглощения атом окажется в состоянии с *m=*+1 (фиг. 16.4, *б).* Амплитуду этого процесса мы обозначим *с.* Затем атом может испустить правый фотон в направлении θ (фиг.16.4,*в*). Полная амплитуда того, что правый фотон рассеется в на­правлении θ, равна просто произведению *с* на (16.1). Обозначая эту амплитуду рассеяния <*R*' |*S* |*R*>*,* имеем

C:\Мои документы\gray.jpg

Имеется также амплитуда того, что поглотится правый фотон, а излучится левый. Произведение обеих амплитуд — это амплитуда <L'|*S*|*R*> *—* амплитуда того, что правый фотон, рассеявшись, превратится в левый. Используя (16.2), имеем

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь посмотрим, что происходит, если на атом падает левый фотон. Когда он поглощается, сам атом переходит в со­стояние с *m* =-1. Рассуждая так же, как в предыдущем па­раграфе, можно показать, что эта амплитуда будет равна -*с.* Амплитуда того, что атом в состоянии с *m*=-1 испустит правый фотон под углом θ, равна произведению *а* на амплитуду <+|*Ry*(θ)| —>, равную 1/2(1- cosθ). В итоге получается

C:\Мои документы\gray.jpg

Наконец, амплитуда того, что левый фотон после рассеяния останется левым, есть

C:\Мои документы\gray.jpg

(здесь минус на минус дал плюс).

Если мы измеряем *интенсивность* рассеяния для любой дан­ной комбинации круговых поляризаций, то она будет пропор­циональна квадрату одной из этих четырех амплитуд. Например, если падает правополяризованный пучок света, то интенсивность правополяризованного света в рассеянном излучении будет меняться как (1 + cosθ)2.

Все это прекрасно, но допустим, что мы хотели бы начать с *линейно* поляризованного света. Чего можно было бы тогда ожидать? Если свет поляризован вдоль оси *х,* его можно пред­ставить как суперпозицию право- и левополяризованного по кругу света. Мы пишем [см. гл. 9, § 4 (вып. 8)]

C:\Мои документы\gray.jpg

Или если свет поляризован вдоль оси *у,* то

C:\Мои документы\gray.jpg

Ч то вы теперь хотите знать? Хотите знать амплитуду того, что *х-* поляризованный фотон рассеется под углом в как правый фотон? Пожалуйста. Примените для этого обычное правило комбинирования амплитуд. Сначала умножьте (16.7) на <*R*'|*S.* Вы получите

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь подставьте сюда (16.3) и (16.5). Получается

C:\Мои документы\gray.jpg

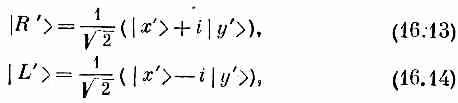
Если бы вам нужна была амплитуда того, что x-фотон рассеется как левый фотон, то вы бы получили

C:\Мои документы\gray.jpg

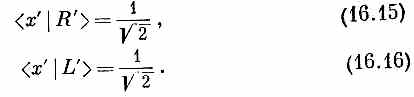
Наконец, представим, что вас заинтересовала амплитуда того, что *x*-поляризованный фотон рассеется, сохранив свою *x*-поляризацию. Значит, вам нужно знать <х'|*S*|*х*>*.* Это мож­но записать так:

C:\Мои документы\gray.jpg

Если вы затем вспомните соотношения



то из них последует



В итоге вы получите

C:\Мои документы\gray.jpg

Ответ, стало быть, состоит в том, что пучок *x*-поляризованного света рассеивается в направлении θ (в плоскости *xz)* с *интен­сивностью,* пропорциональной cos2θ. Если же нас интересует *y*-поляризованный свет, то

C:\Мои документы\gray.jpg

Иначе говоря, рассеянный свет полностью поляризован в *x*-направлении.

Здесь отметим интересную вещь. Формулы (16.17) и (16.18) точно соответствуют классической теории рассеяния света, которую мы излагали в гл. 32, § 5 (вып. 3), считая, что электрон связан с атомом линейной возвращающей силой, что действует он как классический осциллятор. Вы можете подумать: «А в классической теории все было куда проще; если она дает верный ответ, зачем забивать себе голову квантовой теорией?» Во-пер­вых, мы пока рассмотрели только один частный (хотя и частый) случай атома с возбужденным состоянием *j*=1 и с основным состоянием *j*=0. Если бы возбужденное состояние имело спин, равный 2, вы бы получили уже иные результаты. Во-вторых, нет причины, почему бы модель электрона, привязанного к пружинке и приводимого в движение колеблющимся электриче­ским полем, должна была бы быть верна для одиночного фотона. Правда, мы обнаружили, что она все же верна и что интен­сивность и поляризация оказываются какими надо. Так что в каком-то смысле мы в течение нашего курса лавировали где-то неподалеку от истины. В начале курса мы излагали теорию показателя преломления и рассеяния света, опираясь на клас­сические представления. А теперь мы показали, что квантовая теория в самых обычных случаях приводит к тому же результату. Мы фактически только что объяснили такое, скажем, явление, как поляризация дневного света, с помощью квантовомеханических рассуждений, а это единственный по-настоящему закон­ный путь.

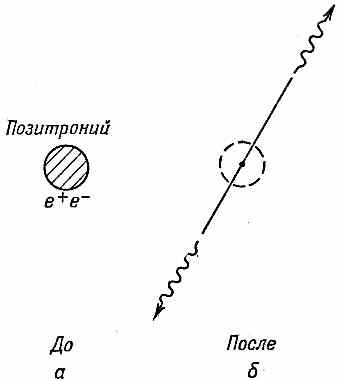
Вообще все имеющие сегодня хождение классические теории должны быть в конечном счете подтверждены единственно пра­вильными квантовыми аргументами. Естественно, что все те вещи, на объяснения которых мы потратили прежде столько времени, были отобраны как раз из тех частей классической физики, которые еще подтверждаются квантовой механикой. Заметьте, что мы не обсуждали во всех деталях такие модели атома, в которых электроны двигались вокруг ядра по орбитам. Это потому, что такая модель не дает результатов, согласуемых с квантовой механикой. Но электрон на пружинке (хоть эта картина ничуть не смахивает на настоящий атом) действительно с ней согласуется, и потому мы применяли эту модель в теории показателя преломления.

**§ 3. Аннигиляция позитрония**

Теперь хотелось бы рассмотреть еще один очень интересный пример. Он очень привлекателен, хотя и немного сложен, но, надеемся, все же не слишком. Пример этот — система, именуе­мая *позитронием,* т. е. «атом», составленный из электрона и позитрона,— связанное состояние *е+* и *е-.* Он походит на атом водорода, только вместо протона стоит позитрон. Как и у водо­рода, у него много состояний. И как у водорода, основное со­стояние вследствие взаимодействия с магнитным моментом рас­щепляется на «сверхтонкую структуру». Спины электрона и позитрона равны 1/2 и могут быть либо параллельны, либо антипараллельны любой данной оси. (В основном состоянии орбитальное движение не создает своего момента количества движения.) Итак, всего есть четверка состояний: три из них — подсостояния системы со спином 1, все с одной энергией; и одно состояние со спином нуль и с иной, отличной энергией. Однако расщепление уровней здесь намного сильнее, чем те 1420 *Мгц,* которые есть в спектре водорода, потому что маг­нитный момент у позитрона куда больше протонного — в 1000 раз.

Но самое важное различие в том, что позитроний не может существовать вечно. Позитрон — это античастица электрона; они могут взаимно друг друга уничтожить. Две частицы полно­стью исчезают, обращая свою энергию покоя в излучение в виде γ-квантов (фотонов). Две частицы с конечной массой покоя переходят в пару (а то и больше) объектов с нулевой [массой покоя](#прим3).

Начнем с анализа распада состояния позитрония со спином нуль. Он распадается на два γ-кванта со временем жизни 10-10 *сек.* Вначале имеются позитрон и электрон с антипараллельными спинами, расположенные очень близко один к другому и образующие систему позитрония. После распада возникают два фотона, разлетающиеся с равными и противоположными импульсами (фиг. 16.5).

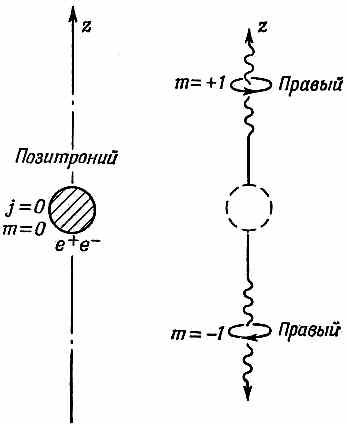


*Фиг. 16.5. Двухфотонная аннигиляция позитрония.*

Импульсы обязаны быть равны и про­тивоположны, потому что полный импульс после распада дол­жен быть таким, как и до распада, т. е. равен нулю (если мы рас­сматриваем аннигиляцию в покое). Если позитроний движется, мы можем нагнать его, решить задачу и затем все преобразовать обратно в лабораторную систему (вот видите — мы теперь все умеем; все, что надо, у нас под рукой).

Для начала заметим, что угловое распределение интереса не представляет. Раз спин начального состояния равен нулю, то нет какой-либо выделенной оси, оно симметрично относи­тельно любых поворотов. Значит, и конечное состояние должно быть симметрично относительно всякого поворота. Это означает, что все углы распада одинаково вероятны — амплитуда выле­теть в любую сторону для фотона одна и та же. Конечно, если *один* из фотонов отправляется в одну сторону, то *другой* отпра­вится в противоположную.

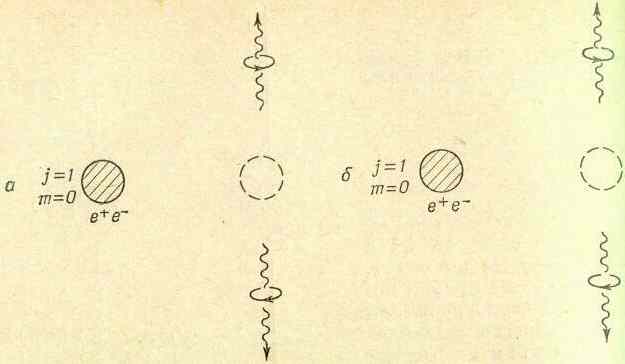
Единственное, что нам остается, это рассмотреть поляриза­цию фотонов. Проведем ось +z по направлению движения од­ного фотона, а ось -*z* по направлению движения второго фотона. Для описания состояний поляризации фотонов можно использовать любые представления. Мы выберем правую и левую круговые поляризации, всегда отсчитывая их относитель­но направлений движения. Сразу же видно, что если движущийся вверх фотон — правый, то момент количества движения оста­нется прежним, если фотон, отправившийся вниз, тоже окажется правым. Каждый унесет по +1 единице момента *относительно направления* [*своего и**мпуль­с**а*](#прим4)*,* что означает +1 и -1 относительно оси *z.* В сумме будет нуль, и мо­мент количества движения после распада окажется та­ким же, как и до распада (фиг. 16.6).



*Фиг. 16.6. Одна из возмож­ностей для аннигиляции пози­трония вдоль оси z.*

Те же рассуждения по­казывают, что если движущийся вверх фотон является правым, то движущийся вниз не может быть левым, ведь тогда конечное состояние обла­дало бы двумя единицами момента количества движения. А это не разрешается, если спин начального состояния равен нулю. Заметьте, что такое конечное состояние невозможно и тогда, когда основное состояние позитрония обладает спином 1, потому что в этом случае наибольшая величина момента количества движения в любом направлении равна единице.

А теперь мы покажем, что двухфотонная аннигиляция из состояния со спином 1 вообще невозможна. Могло бы показать­ся, что это не так, что если взять состояние с *j*=1, *m*=0, у которого момент количества движения относительно оси *z* равен нулю, то оно будет походить на состояние со спином 0 и поэтому распадется на два правых фотона. Конечно, изображен­ный на фиг. 16.7, *а* распад сохраняет момент количества движе­ния относительно оси *z.*



*Фиг. 16.7. Для состояния позитрония с j*=*1 процесс (а) и процесс (б), получаемый поворотом (а) вокруг оси у на 180°, в точности совпадают.*

Но посмотрим, что будет, если мы повернем эту систему вокруг оси *у* на 180°; получится то, что показано на фиг. 16.7, б, т. е. конфигурация, в точности сов­падающая с фиг. 16.7, а. Обменялись местами два фотона и больше ничего. А ведь фотоны — это бозе-частицы; перестановка их местами не меняет знака амплитуды, так что амплитуда распада на конфигурацию, показанную на фиг. 16.7, *б,* должна быть такой же, как и на конфигурацию фиг, 16.7, *а.* Но мы предполо­жили, что у начального объекта спин был равен единице. А когда мы поворачиваем объект со спином 1 в состоянии с *m*=0 на 180° вокруг оси *у,* то его амплитуда меняет знак (см. табл. 15.2 для θ=π, стр. 129). Значит, амплитуды обеих конфигура­ций на фиг. 16.7 должны иметь обратные знаки; частица со спи­ном 1 *не может распадаться на два фотона.*

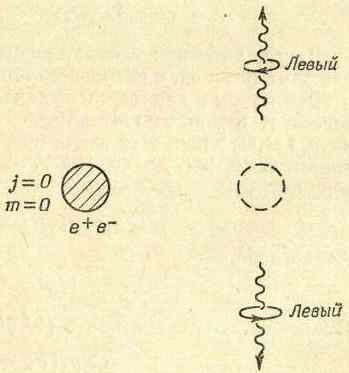
Когда образуется позитроний, то можно ожидать, что в те­чение 1/4 времени он будет превращаться в состояние со спином 0 и в течение 3/4 времени — в состояние со спином 1 (с *m=-*1,0 или +1). Так что 1/4 времени будет происходить двухфотонная аннигиляция. Остальные 3/4 времени двухфотонная аннигиляция происходить не может. Аннигиляция про­исходит, но *на три* фотона. Такой аннигиляции труднее дож­даться, и время жизни получается в 1000 раз дольше — около 10-7 *сек.* Это и наблюдается на опыте. Аннигиляцией состояния со спином 1 мы подробнее заниматься не будем.

До сих пор мы, опираясь на сохранение момента количества движения, считали, что состояние позитрония с нулевым спином может превращаться в два правых фотона. Имеется и другая возможность: это состояние может превратиться в пару левы фотонов, как показано на фиг. 16.8. Следующий вопрос — како-

во соотношение между амплитудами этих двух типов распада? Это можно узнать, учтя сохранение четности.

Но для этого нам нужно знать четность позитрония. Физи­ки-теоретики показали (сложным путем, который нелегко пояс­нить), что четности электрона и позитрона (его античастицы) должны быть противоположны, так что основное состояние позитрония со спином 0 должно обладать отрицательной чет­ностью. Мы просто предположим, что четность отрицательна, и, поскольку мы получим согласие с экспериментом, мы сочтем это достаточно убедительным доводом.

Посмотрим же, что произойдет, если мы проделаем инверсию процесса на фиг. 16.6. При инверсии оба фотона меняют свои направления и поляризации. Обращенная картина выглядит так, как показано на фиг. 16.8.



*Фиг. 16.8 Другой мыслимый процесс аннигиляции позитрония.*

Если считать, что четность по­зитрония отрицательна, то амплитуды процессов на фиг. 16.6 и 16.8 должны иметь обратные знаки. Пусть |*R*1*R*2> *—* конеч­ное состояние на фиг. 16.6, где оба фотона правые, а | *L*1*L*2*> —* конечное состояние на фиг. 16.8, где оба фотона — левые. Ис­тинное конечное состояние (обозначим его |*F*>) должно быть таким:

C:\Мои документы\gray.jpg

Тогда инверсия поменяет местами все *R* со всеми *L* и приведет к состоянию

C:\Мои документы\gray.jpg

имеющему по сравнению с (16.19) знак минус. Значит, конечное состояние |*F*>обладает отрицательной четностью, совпадаю­щей с четностью первоначального состояния позитрония со спином 0. Это единственное конечное состояние, кото­рое сохраняет и момент количества движения и четность. Можно, конечно, вычислить амплитуду то­го, что произойдет распад в это состояние, но мы не будем этим заниматься, нас сейчас интересует только поляризация.

Что же означает состояние (16.19) физически? Один из вы­водов таков: если мы наблюдаем пару фотонов при помощи двух детекторов, которые могут порознь считать число левых или число правых фотонов, то мы всегда будем видеть одновре­менно либо пару правых, либо пару левых фотонов. Иначе го­воря, если вы встанете по одну сторону позитрония, а ваш прия­тель по другую, то вы сможете, измеряя поляризацию, сказать вашему приятелю, какая поляризация у него получилась. С ве­роятностью 50% вы будете ловить то левый, то правый фотон; что вы поймаете, то и предсказывайте.

Раз левая и правая поляризации встречаются поровну, то все это сильно смахивает на линейную поляризацию. Спросим себя, что будет, если наблюдать фотон с помощью счетчиков, которые воспринимают только линейно поляризованный свет? Поляризацию γ-квантов измерять не так легко, как поляриза­цию света; нет таких поляризаторов, которые на столь коротких волнах хорошо работают. Но вообразим, чтобы облегчить об­суждение, что такое бывает. Пусть имеется счетчик, который воспринимает только *x*-поляризованный свет, а по ту сторону позитрония стоит кто-то, кто тоже наблюдает линейно поляри­зованный свет, но только, скажем, *y*-поляризованный. Каков шанс, что вы оба одновременно заметите фотоны от аннигиля­ции? Нужно найти амплитуду того, что |*F*>будет в состоянии *|х*1*y*2>. Иными словами, мы ищем амплитуду

<*х*1*y*2|*F*>*,*

которая, конечно, равна просто разности

C:\Мои документы\gray.jpg

Далее, хотя нам сейчас нужны двухчастичные амплитуды для двух фотонов, с ними здесь можно обращаться так же, как с амплитудами для отдельных частиц, ведь каждая частица действует независимо от другой. Это значит, что амплитуда <*x*1*y*2|*R*1*R*2*>* попросту равна произведению двух независимых амплитуд <*x*1|*R*1> и <*y*2|*R*2>. Эти амплитуды (см. табл. 15.3, стр. 130) равны 1/√2 и *i*/√2, так что

C:\Мои документы\gray.jpg

Аналогично,

C:\Мои документы\gray.jpg

Вычитая их, как сказано в (16.21), получаем

C:\Мои документы\gray.jpg

Значит, *если* вы заметите в своем *x*-поляризованном детекторе фотон, то ваш приятель с вероятностью *единица* тоже заметит фотон в своем *y*-поляризованном [детекторе](#прим5).

Теперь предположим, что ваш приятель настраивает свой счетчик на ту же *х*-поляризацию, что и вы. Тогда он ни за что не получит отсчета одновременно с вами. Подсчитав все, что надо, вы найдете, что

C:\Мои документы\gray.jpg

Естественно, если вы настроите свой счетчик на *y*-поляризацию, то ваш приятель будет получать совпадающие отсчеты только тогда, когда он сам настроится на *z-*поляризацию.

Все это создает интересное положение. Представьте, что вы взяли кусок известкового шпата, который разделяет фотоны на *х-* и *y*-поляризованные пучки, и в каждом пучке поставили по счетчику. Назовем один из них *x*-счетчик, другой — *y*-счетчик. Если ваш приятель, стоящий по другую сторону, сделает то же самое, вы всегда сможете его предупредить, в каком пучке со­бирается пройти его фотон. Всякий раз, как у вас и у него полу­чаются одновременные отсчеты, вы можете посмотреть, в какой из ваших детекторов попал фотон, и дать ему знать, какой из его счетчиков поймал фотон. Пусть, скажем, в некотором распаде вы обнаружите, что фотон вошел в ваш *x*-счетчик; тогда вы крик­нете ему, что в его *y*-счетчике произошел отсчет.

Многих людей, изучающих квантовую механику обычным (старомодным) способом, это обстоятельство очень волнует. Им хотелось бы считать, что когда фотон излучается, то он движется как волна определенного характера. Они хотели бы думать, что поскольку «каждый данный фотон» обладает некото­рой «амплитудой» того, что он окажется *х-* или *y*-поляризованным, то должен быть определенный шанс поймать его либо в *х-* , либо в *y*-счетчике, и что этот шанс не должен зависеть от того, что обнаруживает другой человек у совершенно другого фотона. Они доказывают, что «если кто-то другой делает измерения, он не должен быть в состоянии изменить вероятность того, что я обнаружу». Наша квантовая механика утверждает, однако, что, делая измерения над фотоном № 1, вы в состоянии пред­сказать точно, какая собирается быть поляризация у фотона № 2. С этим никак не мог согласиться Эйнштейн. Этот парадокс, так называемый «парадокс Эйнштейна — Подольского — Розена», его очень беспокоил. Но если описать положение вещей так, как это было сделано у нас, то вообще нет никакого парадокса; вполне естественно получается, что то, что измеряется в одном месте, коррелировано с тем, что измеряется где-то в дру­гом. Рассуждать, чтобы результат стал парадоксальным, надо примерно так:

1) Если у вас есть счетчик, который сообщает вам, какой ваш фотон — правый или левый, то вы можете точно предсказать сорт фотона (правый или левый), который обнаружит ваш при­ятель.

2) Каждый фотон, который он принимает, должен поэтому быть либо чисто левым, либо чисто правым, причем часть фото­нов будет одного сорта, а часть другого.

3) Вы бесспорно не в состоянии переменить физическую при­роду *его* фотонов, меняя характер тех наблюдений, которые вы совершаете над *вашими* фотонами. Какие бы вы измерения ни проделывали над своими фотонами, его фотоны по-прежнему должны быть либо правыми, либо левыми.

4) Допустим, что он меняет свой аппарат так, чтобы расще­пить свои фотоны при помощи куска известкового шпата на два линейно поляризованных пучка, так что все его фотоны перейдут либо в *x*-поляризованный, либо в *y*-поляризованный пучок. Согласно квантовой механике, нет никакого способа сообщить, в какой из пучков перейдет заданный правый фотон. Есть 50%-ная вероятность, что он пойдет в *x*-пучок, и 50%-ная вероятность, что в *y*-пучок. То же будет и с левым фотоном.

5) Поскольку каждый фотон является либо левым, либо правым (согласно пунктам 2 и 3), то каждый из них должен с 50%-ной вероятностью перейти либо в *x*-пучок, либо в *y*-пучок, и невозможно предсказать, какой путь он выберет.

6) А теория предсказывает, что если *вы* заметили, что ваш фо­тон прошел через *x*-поляризатор, то вы со *всей определенностью* можете предсказать, что его фотон пройдет в его *y*-поляризованном пучке. Это противоречит пункту 5, так что налицо пара­докс.

Но природа, по всей видимости, не замечает этого «пара­докса», потому что опыт свидетельствует о том, что предсказание пункта 6 в действительности верно. Мы уже обсуждали ключ к решению этого «парадокса» в нашей самой первой лекции по квантовомеханическому поведению [см. гл. 37 (вып. 3)]. В при­веденном выше рассуждении пункты 1, 2, 4 и 6 все правильны, а пункт 3 и, как следствие этого, пункт 5 — ошибочны; они не являются правильным описанием природы. Рассуждение в пункте 3 говорит, что с помощью *вашего* измерения (наблюдения правого или левого фотона) вы можете определить, какое из двух взаимоисключающих событий произойдет у него (увидит ли он правый фотон или левый), *и* что даже если вы *не проде­лаете* своих измерений, вы все равно сможете сказать, что у него произойдет либо одно событие, либо другое. В этом и состоит суть рассказанного в гл. 37 (вып. 3) — подчеркнуть сразу, с са­мого начала, что в Природе дело обстоит совсем не так. Ее путь требует описания на языке интерферирующих амплитуд, по одной амплитуде для каждого события, исключающего другие события. Измерение, в котором действительно реализуется одна из возможностей, разрушает интерференцию, но если измерение проделано *не было,* вы не вправе говорить, что все равно реали­зуется либо одна возможность, либо другая».

Вот если бы вы могли определить для каждого из ваших фо­тонов, какой он — правый или левый и, *кроме того,* являет­ся ли он *x*-поляризованным (все для одного и того же фотона), то это действительно было бы парадоксом. Но этого вы не сможете сделать — перед вами пример принципа неопределенности.

Если вы все еще не удовлетворены и считаете это «парадок­сом», то покажите, что это действительно парадокс: придумайте такой воображаемый опыт, для которого теория квантовой ме­ханики двумя различными рассуждениями предсказывала бы два несогласующихся результата. В противном случае «пара­докс» — это всего лишь конфликт между тем, что есть на самом деле, и вашим ощущением того, какой «полагалось бы быть» реальной природе.

Вы считаете, что это *не* «парадокс», но что это все же очень странно? С этим мы все можем согласиться. Именно это и делает физику столь захватывающе интересной.

**§ 4. Матрица поворота для произвольного спина**

Сейчас, я надеюсь, вам уже ясно, как важно представ­ление о моменте количества движения для понимания атомных процессов. До сих пор мы рассматривали только системы со спи­нами (или «полными моментами количества движения») 0, 1/2 и 1. Но бывают, конечно, и атомные системы с большими момента­ми количества движения. Для анализа таких систем нужны такие же таблицы амплитуд поворота, какие мы привели в гл. 15, § 6. Иными словами, нужна матрица амплитуд для спина 3/2, 2, 5/2, 3 и т. д. Мы не будем подробно рассчитывать эти таблицы, но хотели бы показать, как это делается, чтобы вы, если понадобится, могли сами это проделать.

Как мы видели раньше, любая система со спином, или «пол­ным моментом количества движения», *j* может существовать в одном из 2/ + 1 состояний, в которых z-компонента момента количества движения принимает одно из дискретных значе­ний *j*, *j*-1, *j -*2, . . ., -(*j*-1), -*j* (все в единицах *h).* Обозначая z-компоненту момента количества движения про­извольного выбранного состояния через *mh,* можно определить состояние момента количества движения, задав численные значения двух «квантовых чисел момента количества движения» *j* и *m.* Такое состояние можно отметить, указав вектор состоя­ния | j, *m*>*.* В случае частиц со спином 1/2 могут быть два состоя­ния | 1/2, 1/2) и | 1/2, -1/2> a состояния системы со спином 1 в этих обозначениях можно записать как |1, +1>, |1, 0>, | 1, -1>*.* У частицы со спином 0 может быть, конечно, лишь одно

состояние | 0, 0>.

Теперь мы можем посмотреть, что происходит, когда мы прое­цируем общее состояние | *j,* *m*>на представление, относящееся к повернутой системе осей. Прежде всего известно, что *j* — это число, которое характеризует *систему,* поэтому оно не меняется. При повороте осей мы получим просто смесь различных значе­ний *т* для одного и того же *j*. В общем случае появится амплиту­да того, что система в повернутой системе координат окажется в состоянии | *j*, *m'*>*,* где *m' —* новая z-компонента момента ко­личества движения. Значит, нам нужны матричные элементы <*j*, *m'* |*R*|*j,* *m*>всевозможных поворотов. Мы уже знаем, что бывает, если поворот делается на угол ϕ вокруг оси *z.* Новое состояние — это попросту старое, умноженное на e*imϕ,* у него по-прежнему то же значение *т.* Это можно записать так:

C:\Мои документы\gray.jpg

или, если вам больше нравится,

C:\Мои документы\gray.jpg

(где δm,m' равно единице при *m' = m,* и нулю в прочих случаях).

При поворотах вокруг любой другой оси возникает переме­шивание различных *m*-состояний. Можно было бы, конечно, попытаться подсчитать матричные элементы для произвольных поворотов, описываемых углами Эйлера β,α и γ*.* Но будет легче, если мы вспомним, что самый общий такой поворот может быть составлен из трех поворотов *Rz*(γ), *Ry*(α), *Rz*(β); так что если мы знаем матричные элементы для поворотов вокруг оси *y*, то уже располагаем всем необходимым.

Как же нам найти матрицу поворота для поворота частицы со спином *j* на угол θ вокруг оси *у?* Опираясь на основные за­коны (и на то, что уже было), это сделать нелегко. Мы так посту­пали со спином 1/2: вывели все, что нужно, пользуясь довольно сложными соображениями симметрии. Для спина 1 мы это про­делали уже иначе: рассмотрели частный случай, когда система со спином 1 складывается из двух систем со спином 1/2. Если вы последуете за нами и признаете правильным тот факт, что в общем случае ответы зависят только от спина *j*, а не от того, как скреплены между собой разные части системы со спином *j*, то мы сможем обобщить рассуждения для спина 1 на произвольный спин. Мы сможем, например, соорудить искусственную систему со спином 3/2 из трех объектов со спином 1/2. Мы сможем даже избежать всяких усложнений, вообразив, что все они суть различные частицы — скажем, протон, электрон и мюон. Преобразуя каждый объект со спином 1/2, мы увидим, что происходит со всей системой — надо только вспомнить, что для комбинированного состояния все амплитуды перемножаются. Давайте посмотрим, как все это проходит.

Допустим, мы расположили все три объекта со спином 1/2 спинами вверх; обозначим такое состояние |+++>. Если мы взглянем на него из системы координат, повернутой относительно оси *z* на угол ϕ, то каждый плюс останется плюсом, но умно­жится на е*iϕ/2*. Таких множителей у нас тройка, так что

C:\Мои документы\gray.jpg

Ясно, что состояние |+++> — это как раз то, что мы назы­ваем состоянием *m*=+3/2, или состоянием |3/2, + 3/2>.

Если мы затем повернем эту систему вокруг оси *у,* то у каж­дого из объектов со спином 1/2 появится некоторая амплиту­да стать плюсом или стать минусом, так что вся система станет теперь смесью восьми возможных комбинаций |+++>,

|++->, |+-+>, |-++>, |+-->, |-+->,

|--+> или |--->*.* Ясно, однако, что их можно раз­бить на четыре группы, чтобы каждая соответствовала своему значению *m.* Прежде всего мы имеем |+++>, для которого *m*=3/2. Затем имеется тройка состояний |++->, |+-+> и |-++> — каждое с двумя плюсами и одним минусом. Поскольку каждый из объектов со спином 1/2 имеет равные шансы стать после поворота минусом, то каждая из этих трех комбинаций должна войти на равных паях. Поэто­му возьмем комбинацию

C:\Мои документы\gray.jpg

где множитель 1/√3 поставлен для нормировки. Если мы по­вернем это состояние вокруг оси *z,* то получим множитель e*iϕ/2* для каждого плюса и *e-iφ/2* для каждого минуса. Каждое слагаемое в (16.27) умножится на *eiϕ/2,* и общий множитель е*iϕ/2* мы вынесем за скобки. Такое состояние соответствует нашему представлению о состоянии с *m=*+1/2; мы приходим к выводу, что

C:\Мои документы\gray.jpg

Точно так же можно написать

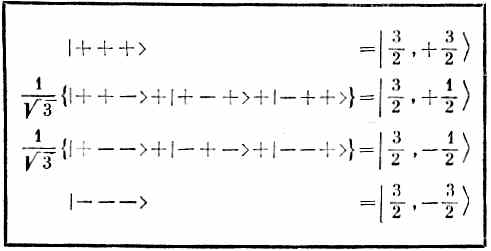
C:\Мои документы\gray.jpg

что соответствует состоянию с *m=-*1/2. Заметьте, что мы берем только *симметричные* сочетания, у нас нет комбинаций, куда входят слагаемые со знаком минус. Они отвечали бы со­стояниям с таким же *т,* но с иным *j*. Это аналогично случаю спина 1, где (1/√2){|+->+|-+>} было состоянием | 1,0>, а (1/√2){|+->-|-+>} было состоянием | 0,0>. Наконец, мы имеем

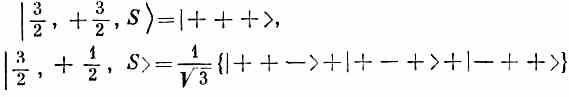
C:\Мои документы\gray.jpg

Эта четверка состояний сведена в табл. 16.1.

*Таблица 16.1* • СВОДКА СОСТОЯНИЙ



Все, что нам теперь нужно сделать, это взять каждое состоя­ние, повернуть его вокруг оси *у* и посмотреть, сколько новых состояний оно создаст — пользуясь известной нам матрицей поворота для частицы спина 1/2. Можно поступать так же, как мы это делали в случае спина 1 [см. гл. 10, § 6 (вып. 8)]. (Только алгебры будет побольше.) Мы будем строго следовать идеям гл. 10 (вып. 8), так что подробных объяснений давать не будем. Состояния в системе *S* будут обозначаться

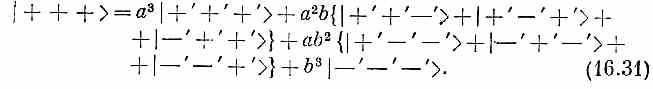


и т. д.; *T*-системой будет считаться система, повернутая вокруг оси *у* системы *S* на угол θ. Состояния в *T*-системе будут обозна­чаться |3/2, + 3/2, *Т*>*,* |3/2, + 1/2, *Т*>и т. д. Ясно, что | 3/2, + 3/2, *Т*>это то же самое, что | +' + ' + ' > (штрихи всегда относятся к *T*-системе). Точно так же |3/2, +1/2, *Т*>будет равняться

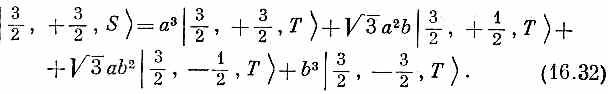
C:\Мои документы\gray.jpg

и т. д. Каждое |+'>-состояние в *T*-системе получается как из |+>-, так и из |->-состояний в системе *S с* помощью матрич­ных элементов из табл. 10.4 (вып. 8, стр. 267).

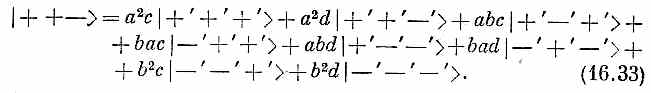
Если мы имеем тройку частиц со спином 1/2, то (10.47) надо заменить на



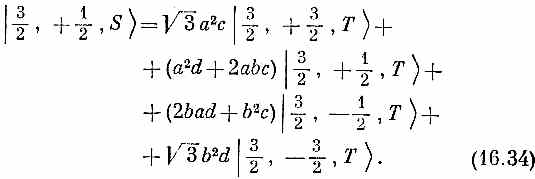
Пользуясь обозначениями табл. 10.4, получим вместо (10.48) уравнение



Это уже дает нам некоторые из наших матричных элементов <*jT|* *iS*>*.* Чтобы получить выражение для 3/2, +1/2, *S*> мы дол­жны исходить из преобразования состояния с двумя плюсами и одним минусом. К примеру,



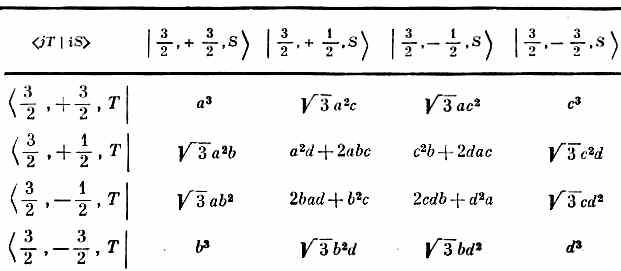
Добавляя два сходных выражения для + — +> и | — + +> и деля на ]/3, найдем



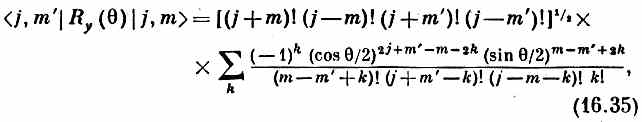
Продолжая этот процесс, мы найдем все элементы <*jТ*|*iS>* матрицы преобразования. Они приведены в табл. 16.2. Первый столбец получается из (16.32), второй — из (16.34). Последние два столбца были вычислены таким же способом. Теперь допустим, что *T*-система была повернута относительно *S*-системы на угол θ вокруг ее оси *у.* Тогда *а, b, с* и *d* равны [см. (10.54), вып. 8]: *а=d=*cosθ/2, *с*=-*b*=sinθ/2. Под­ставляя это в табл. 16.2, получаем формулы, похожие на вторую половину табл. 15.2, но на этот раз для системы со спином 3/2.

*Таблица 16.2* • МАТРИЦА ПОВОРОТА ДЛЯ ЧАСТИЦЫ СО СПИНОМ 3/2

Коэффициенты *а, b, с* и *d* объясняются в табл. 10.4.



Рассуждения, которые мы только что провели, были обобще­ны на систему с произвольным спином *j*. Состояния |*j, m*> можно составить из 2*j* частиц со спином 1/2 у каждой. (Из них *j+m* будут в ] + >-состоянии, а *j*-*m* будут в |->-состоянии.) Проводится суммирование по всем возможным способам, какими их можно сочетать, а затем состояния нормируются умноже­нием на надлежащую постоянную. Если у вас есть способности к математике, то вы сможете доказать, что получается следую­щий [результат](#прим6):



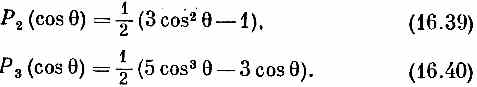
где *k* пробегает все те значения, при которых под знаком факториала получаются неотрицательные величины.

Это очень запутанная формула, но с ее помощью вы сможете проверить табл. 15.2 для *j*=1 (стр. 129) и составить ваши собственные таблицы для больших *j.* Некоторые матричные элементы очень важны и получили особые наименования. Например, матричные элементы для *m= m'=*0и целых *j* известны под названием полиномов Лежандра и обозначаются </, 0 | C:\Мои документы\gray.jpg

Первые из них таковы:

P0(cosθ)=l, (16.37)

p1(cosθ)=cosθ, (16.38)



**§ 5. Измерение ядерного спина**

Продемонстрируем теперь пример, где понадобятся только что описанные коэффициенты. Он связан с проделанными не так давно интересными опытами, которые вы теперь в состоянии будете понять. Некоторым физикам захотелось узнать спин одного из возбужденных состояний ядра Ne20. Для этого они принялись бомбить углеродную мишень пучком ускоренных ионов углерода и породили нужное им возбужденное состояние Ne20 (обозначаемое Ne20\*) в реакции

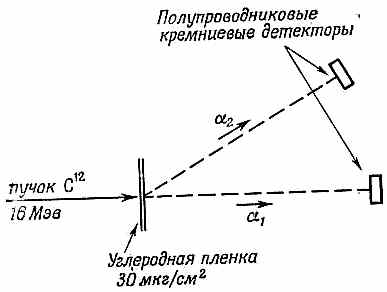
C:\Мои документы\gray.jpg

где α1 — это α-частица, или Не4. Кое-какие из создаваемых таким образом возбужденных состояний Ne20 неустойчивы и распадаются таким путем:

C:\Мои документы\gray.jpg

Значит, на опыте видны возникающие в реакции две α-частицы. Обозначим их α1и α2; поскольку они вылетают с разными энер­гиями, их можно отличить друг от друга. Кроме того, выбирая α1, имеющие нужную энергию, мы можем отобрать любые воз­бужденные состояния Ne20.

Опыт ставился так, как показано на фиг. 16.9.



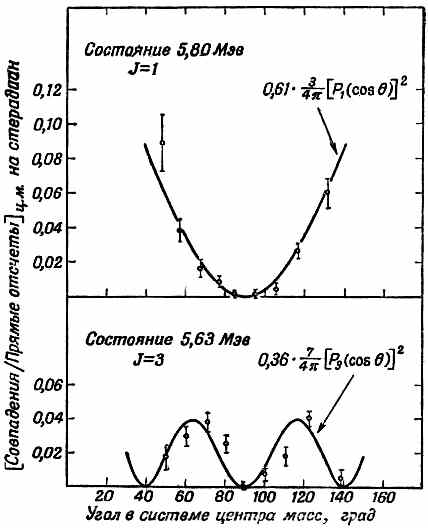
*Фиг. 16.9. Размещение приборов в опыте по определению спина воз­бужденных состояний* Ne20.

Пучок ионов углерода с энергией 16 *Мэв* был направлен на углеродную пленку. Первая α-частица регистрировалась кремниевым детектором, настроенным на прием α-частиц с нужной энергией, движущихся вперед (по отношению к падающему пучку ионов С12). Вторая α-частица регистрировалась счетчиком α2, поставленным под углом θ к α1. Скорость счета сигналов совпа­дений от α1 и α2 измерялась как функция угла θ.

Идея опыта в следующем. Прежде всего нужно знать, что спины С12, О16 и α-частицы все равны нулю. Назовем направ­ление движения начальных частиц С12 направлением +z; тогда известно, что Ne20\* должен обладать нулевым моментом коли­чества движения относительно оси *z.* Ведь ни у одной из осталь­ных частиц нет спина; кроме того, С12 прилетает вдоль оси *z* и α1 улетает вдоль оси z, так что у них не может быть момента относительно этой оси. И каким бы ни был спин *j* ядра Ne20\*, мы знаем, что это ядро находится в состоянии |*j*, 0>*.* Что же случится, когда Ne20\* распадется на О16 и другую α-частицу? Что ж, α-частицу поймает счетчик α2, а О16, чтобы сохранить начальный импульс, вынужден будет уйти в противоположную [сторону](#прим7). *Относительно новой оси* (оси α2) не может быть тоже никакой компоненты момента количества движения. А раз конечное состояние имеет относительно новой оси нулевой мо­мент количества движения, то у распада Ne20\* должна быть некоторая амплитуда того, что *m'*=0, где *m'—*квантовое число компоненты момента количества движения относительно новой оси. Вероятность наблюдать α2 под углом θ будет на самом деле равна квадрату амплитуды (или матричного эле­мента)

C:\Мои документы\gray.jpg

Чтобы получить спин интересующего нас состояния Ne20\*, вычертим интенсивность наблюдений второй α-частицы как функцию угла и сравним с теоретическими кривыми для раз­личных значений *j.* Как мы отмечали в конце предыдущего параграфа, амплитуды <*j*,0|*Ry*(θ)|*j*,0>—это просто функции *Рj*(cosθ). Значит, угловые распределения будут следовать кри­вым [*Pj*(cosθ)]2. Экспериментальные результаты для двух возбужденных состояний показаны на фиг. 16.10.



*Фиг. 16.10. Экспе­риментальные резуль­таты измерений уг­лового распределения α-частиц, вылетающих при распаде двух воз­бужденных состояний Ne20.*

*Они получены на устрой­стве, показанном на фиг. 16.9.*

Вы видите, что угловое распределение для состояния 5,80 *Мэв* очень хорошо укладывается на кривую *[Р*1(cosθ)]2, т. е. оно должно быть состоянием со спином 1. С другой стороны, данные для состоя­ния 5,63 *Мэв* выглядят совершенно иначе; они ложатся на кривую [*Р*3(cosθ)]2. Спин этого состояния равен 3.

В этом опыте мы измерили момент количества движения двух возбужденных состояний Ne20\*. Этой информацией можно воспользоваться, чтобы понять, как ведут себя протоны и нейтроны внутри этого ядра, и это принесет нам добавочные сведения о таинственных ядерных силах.

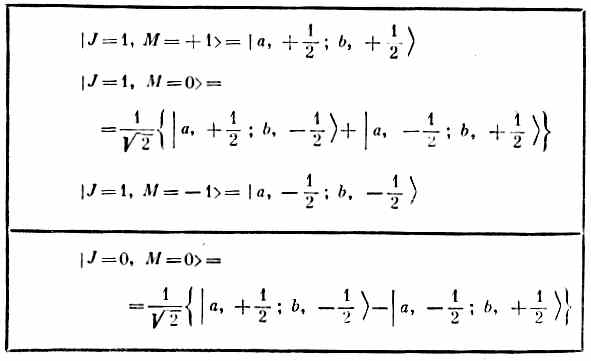
**§ 6. Сложение моментов количества движения**

Когда мы изучали сверхтонкую структуру атома водорода в гл. 10 (вып. 8), нам пришлось рассчитывать внутренние состоя­ния системы, составленной из двух частиц — электрона и протона — со спинами 1/2. Мы нашли, что четверка возможных спиновых состояний такой системы может быть разбита на две группы — на тройку состояний с одной энергией, которая во внешнем поле выглядела как частица со спином 1, и на одно ос­тавшееся состояние, которое вело себя как частица со спином 0. Иначе говоря, объединяя две частицы со спином 1/2, можно образовать систему, «полный спин» которой равен либо единице, либо нулю. В этом параграфе мы хотим рассмотреть на более общем уровне спиновые состояния *системы,* составленной из двух частиц с произвольными спинами. Это другая важная проблема, связанная с моментами количества движения квантовомеханической системы.

Перепишем сперва результаты гл. 10 для атома водорода в форме, которая позволит распространить их на более общий случай. Мы начали с двух частиц, которые теперь обозначим так: частица *а* (электрон) и частица *b* (протон). Спин частицы *а* был равен *ja* (=1/2), a z-компонента момента количества движе­ния *mа* могла принимать одно из нескольких значений (на са­мом деле два, а именно *mа*=+1/2 или *mа=-*1*/*2). Точно так же спиновое состояние частицы *b* описывалось ее спином *jb* и z-компонентой момента количества движения *mb.* Из всего этого можно было составить несколько комбинаций спиновых состояний двух частиц. Например, из частицы *а* с *mа*= 1/2 и частицы *b* с *mb*=-1/2 можно было образовать состояние | а, +1/2; *b, -*1/2>. Вообще, объединенные состояния образовы­вали систему, у которой «спин системы», или «полный спин», или «полный момент количества движения» *J* мог быть равен либо единице, либо нулю, а z-компонента момента количества движения *М* могла равняться +1, 0 или -1 при *J*=1 и нулю при *J*=0. На этом новом языке формулы (10.41) и (10.42) можно переписать так, как показано в табл. 16.3.

Левый столбец таблицы описывает составное состояние через его полный момент количества движения *J* и *z*-компоненту М.

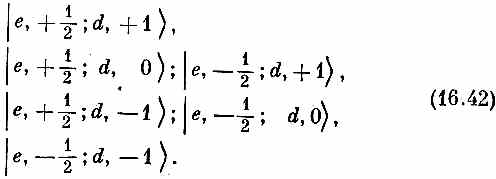
*Таблица 16.3* • СОСТАВЛЕНИЕ МОМЕНТОВ КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ ДВУХ ЧАСТИЦ СО СПИНОМ 1/2,



Правый столбец показывает, как составляются эти состояния из значений *т* двух частиц *а* и *b.*

Мы хотим обобщить этот результат на состояния, составлен­ные из двух объектов *а* и *b с* произвольными спинами *jа* и *jb*. Начнем с разбора примера, когда *jа*=1/2 и *jb*=1, а именно с атома дейтерия, в котором частица *а —* это электрон *е,* а части­ца *b —* ядро, т. е. дейтрон *d.* Тогда *ja*=*je=*1*/*2. Дейтрон обра­зован из одного протона и одного нейтрона в состоянии с пол­ным спином 1, так что *jb=jd=*1. Мы хотим рассмотреть сверхтонкие состояния дейтерия, как мы сделали это для водо­рода. Поскольку у дейтрона может быть три состояния, *mb*= *md*=+1, 0, -1, а у электрона — два, *mа*=*mе*=+1/2, -1/2, то всего имеется шесть возможных состояний, а именно (используется обозначение

| *е, me*; *d, md*>):



Обратите внимание, что мы разверстали состояния согласно значениям суммы *me* и *md* в порядке ее убывания.

Спросим теперь: что случится с этими состояниями, если спроецировать их в другую систему координат? Если эту новую систему просто повернуть вокруг оси *z* на угол ϕ, то состояние | *е, me*; *d, md*>умножается на

C:\Мои документы\gray.jpg

(Состояние можно считать произведением |*е, mе*>|*d, md*>, и каждый вектор состояния независимо привнесет свой собст­венный экспоненциальный множитель.) Множитель (16.43) имеет форму *еiMϕ,* поэтому z-компонента момента количества движения у состояния | *е, mе; d, md*>окажется равной

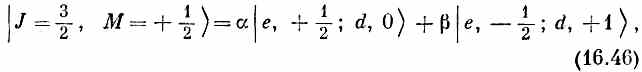
*M=me+md.* (16.44)

Иначе говоря, *z-компонента полного момента количества движения есть сумма z-компонент моментов количества движе­ния отдельных частей.*

Значит, в перечне состояний (16.42) верхнее состояние имеет *М*=+3/2, Два следующих *М*=+1/2, затем два *М*=-1/2и последнее состояние *М=-*3/2. Мы сразу же видим, что одной из возможностей для спина *J* объединенного состояния (для полного момента количества движения) должно быть 3/2, это потребует четырех состояний с *М=* +3/2, +1/2*,* -1/2 и - 3/2. На *М=+*3/2 есть только один кандидат, и мы сразу видим, что

C:\Мои документы\gray.jpg

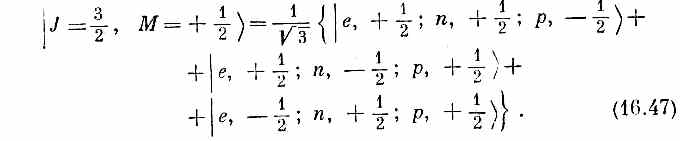
Но что является состоянием |*J*=3/2, *М*=+1/2>? Кандидатов здесь два, они стоят во второй строчке (16.42), и всякая их ли­нейная комбинация тоже даст *М=*+1/2*.* Значит, в общем случае можно ожидать, что



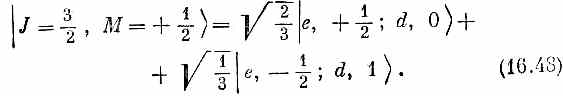
где α и β — два числа. Ихименуют *коэффициенты Клебша — Гордона.* Найти их и будет нашей очередной задачей.

И мы их легко найдем, если просто вспомним, что дейтрон состоит из нейтрона и протона, и в явном виде распишем со­стояния дейтрона, пользуясь правилами табл. 16.3. Если это проделать, то перечисленные в (16.42) состояния будут выгля­деть так, как показано в табл. 16.4.

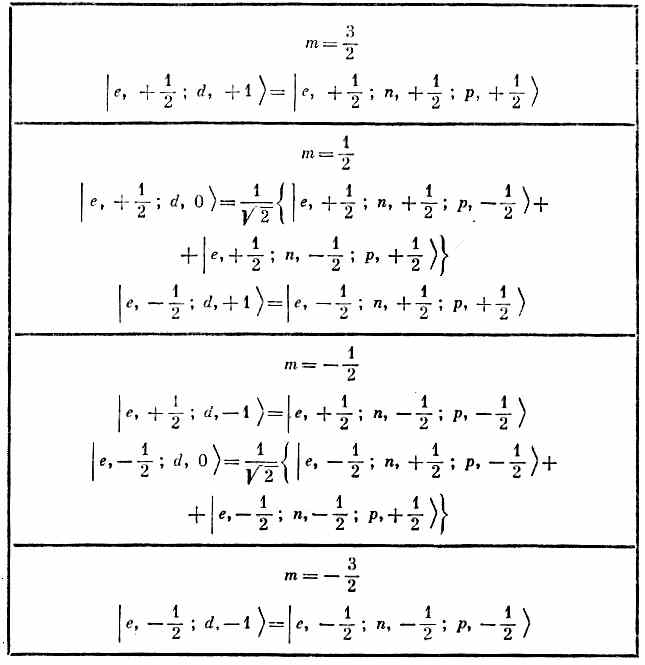
Пользуясь состояниями из этой таблицы, мы хотим образо­вать четверку состояний с *J*=3/2. Но ответ нам уже известен, потому что в табл. 16.1 уже стоят состояния со спином 3/2, образованные из трех частиц со спином 1/2. Первое состояние в табл. 16.1 имеет |*J*=3/2, *М*=+3/2>, это |+++>, а в наших нынешних обозначениях это |*e,* +1/2; *n,* + 1/2; *p,* +1/2>, или первое состояние из табл. 16.4. Но это состояние — то же самое, что первое по списку в (16.42), так что наше выражение (16.45) подтверждается. Вторая строчка в табл. 16.1 утверждает, если воспользоваться нашими теперешними обозначениями, что



То, что стоит в правой части, можно, очевидно, составить из двух членов во второй строчке табл. 16.4, взяв √2/3 от пер­вого члена и √1/3от второго. Иначе говоря, (16.47) эквива­лентно



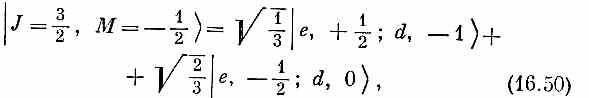
*Таблица 16.4* • СОСТОЯНИЯ МОМЕНТА КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ АТОМА ДЕЙТЕРИЯ



Мы нашли два наших первых коэффициента Клебша — Гор­дона α*,* и β [см. (16.46)]:



Повторяя ту же процедуру, найдем

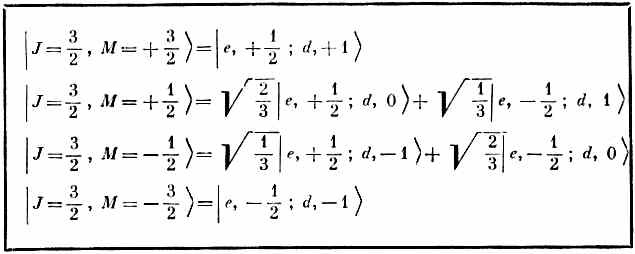


а также, конечно,

C:\Мои документы\gray.jpg

Это и есть правила составления из спина 1 и спина 1/2 полного спина *J*=3/2. Мы свели (16.45) и (16.50) в табл. 16.5.

*Таблица 16.5 •* СОСТОЯНИЯ С *J*=3/2 АТОМА ДЕЙТЕРИЯ



Но у нас пока есть только четыре состояния, а у системы, которую мы рассматриваем, их шесть.

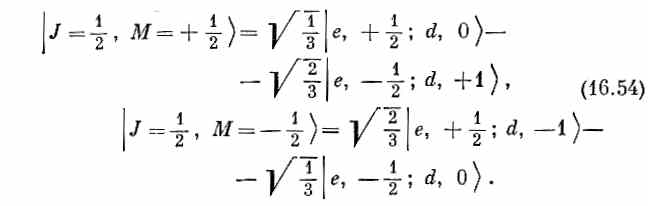
Из двух состояний во второй строчке (16.42) мы для об­разования |*J*=3/2, *М*=+1/2> составили только одну линей­ную комбинацию. Есть и другая линейная комбинация, орто­гональная к ней, у нее тоже *М*=+1/2 и она имеет вид

C:\Мои документы\gray.jpg

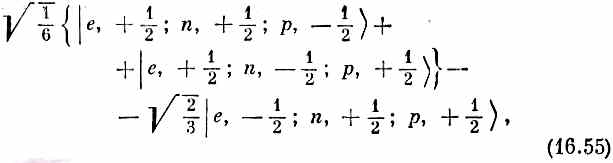
Точно так же из двух состояний в третьей строке (16.42) можно скомбинировать два взаимно-ортогональных состояния, каждое с *М =-*1/2. То, которое ортогонально к (16.50), имеет вид

C:\Мои документы\gray.jpg

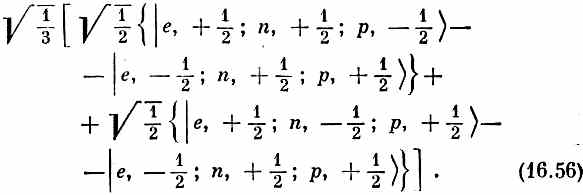
это и есть два оставшихся состояния. У них *M=me+md=*±1/2; эти состояния должны соответствовать *J*=1/2. Итак, мы имеем



Можно убедиться, что эти два состояния действительно ведут себя как состояния объекта со спином 1/2; для этого надо выразить дейтронную часть через нейтронные и протонные со­стояния (при помощи табл. 16.3). Первое состояние в (16.53) превратится в

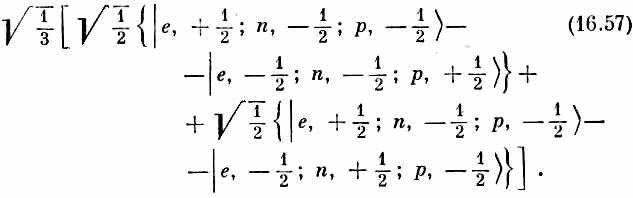


(16.55) а это можно переписать так:



Посмотрите теперь на выражение в первых фигурных скобках и подумайте, что получается при объединении *е* и *р.* Вместе они образуют состояние с нулевым спином (см. нижнюю строку в табл. 16.3) и не дают вклада в момент количества движения. Остался только нейтрон, значит, вся *первая* фигурная скобка (16.56) будет вести себя при поворотах как нейтрон, а именно как состояние с *J=*1/2*, M=+*1/2.

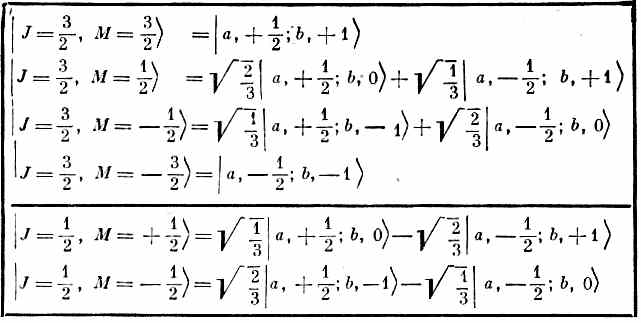
Повторяя те же рассуждения, убедимся, что во *вторых* фигурных скобках (16.56) электрон и нейтрон объединяются, чтобы образовать нулевой момент количества движения, и ос­тается только вклад протона — с *mp*=+1/2. Скобка опять ведет себя как объект с *J*=+1/2, *М*=+1/2. Значит, и все выра­жение (16.56) преобразуется как |*J*=+1/2, *М*=+1/2>, чего мы и хотели. Состояние *М=*-1/2,отвечающее формуле (16.56), можно расписать так (заменив везде, где нужно, +1/2 на -1/2):



Вы легко проверите, что это совпадает со второй строчкой в (16.54), как и полагается, если каждая скобка представляет собой одно из двух состояний системы со спином 1/2. Значит, наши результаты подтвердились. Дейтрон и электрон могут существовать в шести спиновых состояниях, четыре из которых ведут себя как состояния объекта со спином 3/2 (табл. 16.5), а два — как объект со спином J/2 (16.54).

Результаты табл. 16.5 и уравнения (16.54) мы получили, вос­пользовавшись тем, что дейтрон состоит из нейтрона и протона. Правильность уравнений не зависит от этого особого обстоятель­ства. Для *любого* объекта со спином 1, объединяемого с объектом со спином 1/2, законы объединения (и коэффициенты) одни и те же. Совокупность уравнений в табл. 16.5 означает, что если система координат поворачивается, скажем, вокруг оси *у,* так что состояния частицы со спином 1*/*2и частицы со спином 1 изме­няются согласно табл. 16.1 и 16.2, то линейные комбинации по правую сторону знака равенства будут изменяться так, как это свойственно объекту со спином 3/2. При таком же повороте со­стояния (16.54) будут меняться как состояния объекта со спи­ном 1/2. Результаты зависят только от свойств относительно пово­ротов (т. е. от спиновых состояний) двух исходных частиц, но отнюдь не от происхождения их моментов количества движения. Мы этим происхождением воспользовались лишь для вывода формул, выбрав частный случай, в котором одна из составных частей сама состоит из двух частиц со спином 1/2 в симметричном состоянии. Все наши результаты мы свели в табл. 16.6, изменив индексы *е* и *d* на *а* и *b,* чтобы подчеркнуть их общность.

*Таблица 16.6* • ОБЪЕДИНЕНИЕ ЧАСТИЦЫ СО СПИНОМ 1/2( ja=1/2) С ЧАСТИЦЕЙ СО СПИНОМ 1 (*jb*=1)



Поставим теперь себе общую задачу найти состояния, кото­рые можно образовать, объединяя два объекта с произвольными спинами. Скажем, у одного спин *ja* (так что его *z*-компонента *mа* пробегает 2*jа*+1 значений от -*ja* до +*ja*, а у другого *jb* (с z-компонентой *mb,* пробегающей значения от - *jb* до+*jb*).

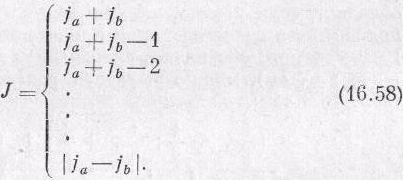
Объединенные состояния суть | а, *mа; b, mb*>*,* их всего (2*ja*+1)(2*jb*+1). Какие же состояния с полным спином / мы обнаружим?

Полная z-компонента *М* момента количества движения рав­няется *mа+mb,* и все состояния можно перечислить, опираясь на величину *М* [как в (16.42)]. Наибольшое *М* является единст­венным; оно отвечает значениям *ma=ja* и *mb=jb* и равно по­просту *ja+jb.* Это означает, что наибольший полный спин *J* также равен сумме *jа+jb*:

*J*=*М*макс=*ja+jb.*

Следующему значению *М,* меньшему чем *М*макс на единицу, будут соответствовать два состояния (либо *mа,* либо *mb* меньше своих максимальных значений на единицу). Из них должно быть образовано одно состояние, принадлежащее совокупности с *J=ja+jb*, и останется еще одно, которое будет принадлежать новой совокупности с *J=ja+jb-*1. Следующее значение *М* (третье сверху) можно составить *тремя* путями (из *ma=ja —* 2, *mb*=*jb*, из *ma=ja-*1, *mb=jb-*1 и из *ma=ja, mb=jb -*2). Два из них принадлежат к уже начавшим составляться груп­пам; третье говорит нам, что надо включить в рассмотрение и со­стояния с *J=ja+jb*-2. Такие рассуждения будут продол­жаться до тех пор, пока уже нельзя будет, меняя то одно, то дру­гое *т,* получать новые состояния.

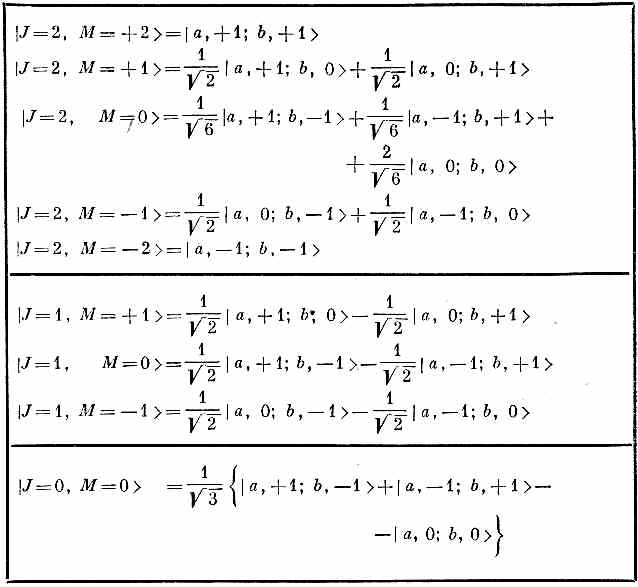
Пусть из *jа* и *jb* меньшим является *jb* (а если они одинаковы, возьмите любое из них); тогда понадобятся только 2*jb* значений полного спина *J*, идущих единичными шагами от *jа+jb* вниз к *jа-jb.* Иначе говоря, когда объединяются два объекта со спинами *jа* и *jb*, то полный момент количества движения *J* их системы может равняться одному из значений:



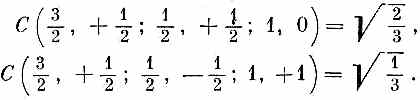
(Написав | *ja-jb* |вместо *ja-jb*, мы можем избежать напо­минания о том, что *ja≥jb.)*

Для *каждого* из этих значений J имеется 2J+1 состояний с различными значениями *М; М* меняется от +*J* до -*J*. Каждое из них образовано из линейных комбинаций исходных состояний | *а, mа*; *b, mb>* с соответствующими коэффициентами — коэффициентами Клебша — Гордона для каждого отдельного члена. Можно считать, что эти коэффициенты дают «количест­во» состояния | *ja, ma*; *jb, mb>,* проявляющегося в состоянии

*Таблица 16.7 •*ОБЪЕДИНЕНИЕ ДВУХ ЧАСТИЦ СО СПИНОМ 1 (*ja*=1, *jb*=1)



I /, *My.* Так что каждый из коэффициентов Клебша — Гордона обладает, если угодно, *шестью* индексами, указывающими его положение в формулах типа приведенных в табл. 16.3 и 16.6. Иначе говоря, обозначая, скажем, эти коэффициенты *С* (*J*, М; *ja, ma*; *jb*, *mb),* можно выразить равенство во второй строчке табл. 16.6 так:



Мы не будем здесь подсчитывать коэффициенты для других [частных случаев](#прим8). Но вы обнаружите такие таблицы во мно­гих книжках. Попробуйте сами подсчитать другой случай, например объединение двух объектов со спином 1. Мы же про­сто привели в табл. 16.7 окончательный результат.

Эти законы объединения моментов количества движения имеют очень важное значение в физике частиц, их приложениям поистине нет конца. К сожалению, у нас нет сейчас больше вре­мени на другие примеры.

**Добавление 1. Вывод** [**мат****рицы поворота**](#прим9)

Для тех, кто хотел бы разобраться в этом поподробнее, мы вычислим сейчас общую матрицу поворота для системы со спи­ном (полным моментом количества движения) *j*. В расчете об­щего случая на самом деле большой необходимости нет; важно понять идею, а все результаты вы сможете найти в таблицах, которые приводятся во многих книжках. Но, с другой стороны, вы зашли уже так далеко, что у вас, естественно, может возник­нуть желание убедиться, что вы и впрямь в состоянии понять даже столь сложные формулы квантовой механики, как (16.35).

Расширим рассуждения § 4 на систему со спином *j*, которую будем считать составленной из 2/ объектов со спином 1/2. Состоя­ние с *m=j* имело бы вид | + + + . . . +> (с *j* плюсами). Для *m=j-*1 было бы 2*j* членов типа | + + . . . + + ->, | + + . . . +- +>и т. д. Рассмотрим общий случай, когда имеет­ся *r* плюсов и *s* минусов, причем *r*+*s*=2*j*. При повороте вокруг оси *r* от каждого из *r* плюсов появится множитель *e+iϕ/2. В* итоге фаза изменится на *i*(*r*/2-*s*/2)ϕ. Мы видим, что

*m=(r-s)/*2 *.* (16.59)

Как и в случае *J*=3/2, каждое состояние с определенным *т* должно быть суммой всех состояний с одними и теми же *r* и *s,* взятых со знаком плюс, т. е. состояний, отвечающих всевозмож­ным перестановкам с *r* плюсами и *s* минусами. Мы считаем, что вам известно, что всего таких сочетаний есть (r+s)!/r!s!. Чтобы нормировать каждое состояние, надо эту сумму разделить на корень квадратный из этого числа. Можно написать



где

C:\Мои документы\gray.jpg

Введем еще новые обозначения, они нам помогут в счете. Ну а поскольку мы уж определили состояния при помощи (16.60), то два числа *r* и *s* определяют состояние ничуть не хуже, чем *j* и *m.* Мы легче проследим за выкладками, если обозначим

C:\Мои документы\gray.jpg

где [см.. (16.61)]

*r = j+m, s = j-т.*

Далее, (16.60) мы запишем, пользуясь *специальным обозна­чением*

C:\Мои документы\gray.jpg

Обратите внимание, что показатель степени в общем множителе мы изменили на +1/2. Это оттого, что внутри фигурных скобок в (16.60) стоит как раз *N*=(r+s)!/r!s! слагаемых. Если сопоста­вить (16.63) с (16.60), то ясно, что

C:\Мои документы\gray.jpg— это краткая запись выражения

C:\Мои документы\gray.jpg

где *N* — количество различных слагаемых в скобках. Эти обо­значения удобны тем, что каждый раз при повороте все знаки плюс вносят один и тот же множитель, так что в итоге он полу­чается в *r*-й степени. Точно так же все знаки минус дадут некоторый множитель в *s*-й степени, в каком бы порядке эти знаки ни стояли.

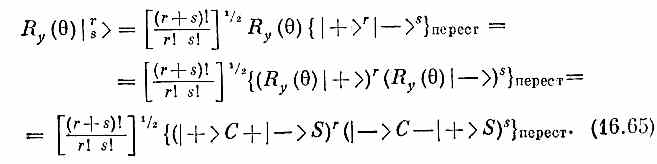
Теперь положим, что мы повернули нашу систему вокруг оси *у* на угол θ. Нас интересуетC:\Мои документы\gray.jpg. Оператор *Ry*(θ), дей­ствуя на каждый |+>, дает

C:\Мои документы\gray.jpg

где *С*=cosθ/2 и *S=*sin θ/2. Когда же *Ry*(θ) действует на | ->, это приводит к

C:\Мои документы\gray.jpg

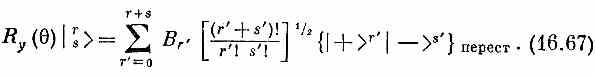
Так что искомое выражение равно



Теперь надо возвысить биномы в степень и перемножить. По­явятся члены со всеми степенями |+ *у* от нуля до r+s. Посмот­рим, какие члены дадут r'-ю степень |+ ). Они всегда будут сопровождаться множителем типа |->s', где *s*'=2*j*-*r'.* Соберем их вместе. Получится сумма членов типа |+>r' |->s' с численными коэффициентами *Аr' ,* куда входят коэффициенты биномиального разложения вместе с множителями *С* и *S.* Урав­нение (16.65) тогда будет выглядеть так:

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь разделим каждое *Аr'* на множитель [*(r'+s')\*l*r'*!*s'*!]*l/2* и обозначим частное через *Вr .* Тогда (16.66) превратится в



[Можно просто сказать, что требование, чтобы (16.67) совпадало с (16.65), определяет *Br*’]

Если так определить *Вr' ,* то оставшиеся множители в правой части (16.67) будут как раз состояниямиC:\Мои документы\gray.jpg. Итак, имеем

C:\Мои документы\gray.jpg

где s' всегда равняется *r+s*-*r'.* А это, конечно, означает, что коэффициенты *Вr'* и есть искомые матричные элементы

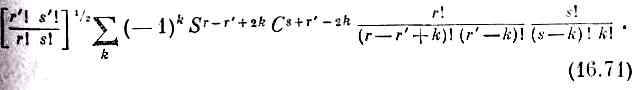
C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь, чтобы найти *B*r', остается немного: лишь про­биться через алгебру.

Сравнивая (16.67) с (16.65) и вспоминая, что *r'+s'=r+s*, мы видим, что *Br*' — это просто коэффициент при *ar'bs'* в вы­ражении

C:\Мои документы\gray.jpg

Осталась лишь нудная работа разложить скобки по биному Ньютона и собрать члены с данными степенями *а* и *b.* Если вы все это проделаете, то увидите, что коэффициент при *аr'bs'* в (16.70) имеет вид



Сумма берется по всем целым *k,* при которых аргументы факто­риалов больше или в крайнем случае равны нулю. Это выраже­ние и есть искомый матричный элемент.

В конце надо вернуться к нашим первоначальным обозначе­ниям *j*, *m* и *m',* пользуясь формулами

*r=j+-m, r'=j+m', s=j-m, s'=j-m'.* Проделав эти подстановки, получим уравнение (16.34) из § 4.

# Добавление 2. Сохранение четности при испускании фотона

В § 1 мы рассмотрели испускание света атомом, который переходит из возбужденного состояния со спином 1 в основное состояние со спином 0. Если спин возбужденного состояния на­правлен вверх (*m*=+1), то атом может излучить вверх вдоль оси +*z* правый фотон или вдоль оси -z левый. Обозначим эти два состояния фотона |*R*вв> и |*L*вн>. Ни одно из них не обладает определенной четностью. Если оператор четности обозначить

C:\Мои документы\gray.jpg

Что же тогда будет с нашим прежним доказательством, что атом в состоянии с определенной энергией должен иметь опре­деленную четность, и с нашим утверждением, что четность в атомных процессах сохраняется? Разве не должно конечное состояние в этой задаче (состояние после излучения фотона) иметь определенную четность? Да, *должно,* если только мы рас­смотрим *полное* конечное состояние, в которое входят амплитуды излучения фотонов под всевозможными углами. А в § 1 мы рассматривали только часть полного конечного состояния.

Если вы хотите, можно рассмотреть только конечные состоя­ния, у которых действительно определенная четность. Напри­мер, рассмотрим конечное состояние |ψk>, у которого есть некоторая амплитуда а оказаться правым фотоном, движу­щимся вдоль оси +z, и некоторая амплитуда β оказаться левым фотоном, движущимся вдоль оси -z. Можно написать

C:\Мои документы\gray.jpg

Оператор четности, действуя на это состояние, дает

C:\Мои документы\gray.jpg

Это состояние совпадает с *±*|ψк> либо при β=α, либо при β=-α. Так что конечное состояние с положительной чет­ностью таково:

C:\Мои документы\gray.jpg

а состояние с отрицательной четностью

C:\Мои документы\gray.jpg

Далее, мы хотим рассмотреть распад возбужденного состоя­ния с отрицательной четностью на основное состояние с положительной четностью и на фотон. Если четность должна сохра­ниться, то конечное состояние фотона должно иметь отрица­тельную четность. Оно обязано быть состоянием (16.75). Если амплитуда того, что будет обнаружено | *R*вв>, есть α, то ампли­туда того, что будет обнаружено | L*вн>,* есть -α.

Теперь обратите внимание на то, что получается, если мы проводим поворот на 180° вокруг оси *у.* Начальное возбужден­ное состояние атома становится состоянием с *m=-*1 (соглас­но табл. 15.2, стр. 129, знак не меняется). А поворот конечного состояния дает

C:\Мои документы\gray.jpg

Сравнивая это с (16.75), мы увидим, что при выбранной нами четности конечного состояния амплитуда того, что при началь­ном состоянии с *m=-*1 будет получен левый фотон, идущий в направлении +z, равна со знаком минус амплитуде того, что при начальном состоянии с *m*=+1 будет получен правый фотон, идущий в направлении -*z.* Это согласуется с результатами, полученными в § 1.

***\* Первоначально материал этого добавления входил в текст лекции, но потом мы поняли, что не стоит включать в нее такое подробное изложе­ние общего случая.***

***\* Тем более, что большая часть работы уже проделана, раз у нас есть общая матрица поворота (16.35).***

***\* Отдачей, которую испытал Ne20\* в первой реакции, можно пренеб­речь. Или, еще лучше, подсчитать и сделать поправку на нее.***

***\* Детали вы найдете в добавлении, стр. 165.***

***\* Мы не нормировали наши амплитуды и не умножали их на амплитуду распада в то или иное конечное состояние, но легко видеть, что наш результат верен, ибо, рассчитывая вторую из взаимоисключающих воз­можностей [см. (16.23)], мы получаем вероятность нуль.***

***\* Заметьте, что мы всегда анализируем момент количества движения относительно направления движения частицы. Если бы мы стали интере­соваться моментом количества движения относительно других осей, нам пришлось бы учесть возможность «орбитального» момента количества движения — от члена pXr. Так, мы не вправе говорить, что фотоны вы­летают прямо из центра позитрония. Они могли вылететь, как два комка с обода вертящегося колеса. О таких подробностях не приходится заду­мываться, если проводить ось вдоль направления движения.***

\* При нашем нынешнем глубоком понимании мира нелегко ответить на вопрос—менее ли «материальна» энергия фотона, чем энергия элек­трона, ведь, как вы помните, все частицы ведут себя очень похоже. Един­ственное различие в том, что у фотона масса покоя равна нулю.

\* Кое-кто может возразить, что все эти рассуждения неверны, по­тому что наши конечные состояния не обладают определенной четностью. В добавлении 2 в конце этой главы вы найдете другое доказательство, которое вас удовлетворит.

***\* Когда мы переводим х, у, z в -х, -у, -z, то можно подумать, что все векторы перевернутся. Это верно для полярных векторов, таких, как смещения и скорости, но не для аксиальных векторов наподобие момента количества движения, да и любых векторов, представляющих собой век­торное произведение двух полярных векторов. Компоненты аксиальных векторов при инверсии не меняются.***

***Главa 17***

# АТОМ ВОДОРОДА

**И ПЕРИОДИЧЕСКАЯ ТАБЛИЦА**

[**§ 1. Уравнение Шре****дингера для атома** **водорода**](#a1)

[**§ 2. Сферичес****ки с****имметричные решения**](#a2)

[**§ 3. Состояни****я** **с угл****овой зависимостью**](#a3)

[**§ 4. Общее р****ешение** **для** **водорода**](#a4)

[**§ 5. Волновые** **фу****нкции водорода**](#a5)

[**§ 6. Периодич****еск****ая таблица**](#a6)

**§ 1. Уравнение Шредингера для атома водорода**

Самым замечательным успехом в истории квантовой механики было объяснение всех дета­лей спектров простейших атомов, а также периодичностей, обнаруженных в таблице химических элементов. В этой главе в нашем курсе кванто­вой механики мы наконец-то подойдем к этому важнейшему достижению и расскажем об объ­яснении спектра атомов водорода. Кроме того, здесь мы расскажем и о качественном объясне­нии таинственных свойств химических элемен­тов. Для этого мы подробно изучим поведение электрона в атоме водорода: в первую очередь мы рассчитаем его распределения в простран­стве, следуя тем представлениям, которые были развиты в гл. 14.

Для полного описания атома водорода сле­довало бы учесть движения обеих частиц — как протона, так и электрона. В квантовой меха­нике в этой задаче следуют классической идее об описании движения каждой из частиц по отношению к их центру тяжести. Однако мы не будем этого делать. Мы просто используем приближение, в котором протон считается очень тяжелым, настолько тяжелым, что он как бы закреплен в центре атома.

Мы сделаем еще и другое приближение: забудем, что у электрона имеется спин и что его надлежит описывать законами релятивист­ской механики. Это потребует внесения неболь­ших поправок в наши выкладки, поскольку мы будем пользоваться нерелятивистским уравне­нием Шредингера и пренебрежем магнитными эффектами. Небольшие магнитные эффекты по­являются из-за того, что протон с точки зрения электрона есть циркулирующий по кругу заряд, который создает магнитное поле. В этом поле энергия элек­трона будет различна, смотря по тому, направлен ли его спин вверх или вниз по полю. Энергия атома должна немного сдви­нуться относительно той величины, которую мы вычислим. Но мы пренебрежем этим слабым сдвигом энергии, т. е. вообра­зим, что электрон в точности подобен волчку, движущемуся в пространстве по кругу и сохраняющему все время одинаковое направление спина. Поскольку речь будет идти о свободном атоме в пространстве, полный момент количества движения будет сохраняться. В нашем приближении будет считаться, что момент количества движения, вызываемый спином электро­на, остается неизменным, так что оставшийся момент количества движения атома (то, что обычно называют «орбитальным» момен­том количества движения) тоже не будет меняться. В очень хоро­шем приближении можно считать, что электрон движется в атоме водорода как частица без спина — его орбитальный момент ко­личества движения постоянен.

В этих приближениях амплитуда того, что электрон будет обнаружен в том или ином месте пространства, может быть пред­ставлена как функция положения электрона в пространстве и времени. Обозначим амплитуду того, что электрон будет обнаружен в точке *х, у, z* в момент *t* через ψ*(x, у, z, t).* Со­гласно квантовой механике, скорость изменения этой ампли­туды со временем дается гамильтоновым оператором, действую­щим на ту же функцию. Из гл. 14 мы знаем, что

C:\Мои документы\gray.jpg

где

C:\Мои документы\gray.jpg

Здесь *m—*масса электрона, а *V* (**r**)— потенциальная энергия электрона в лектростатическом поле протона. Считая на больших удалениях от протона *V*=0, [можно написать](#прим1)

*V=-e*2*/r.*

Волновая функция ψ должна тогда удовлетворять уравнению

C:\Мои документы\gray.jpg

Мы хотим найти состояния с определенной энергией, по­этому попробуем поискать решения, которые бы имели вид

C:\Мои документы\gray.jpg

Тогда функция ψ(**r**) должна быть решением уравнения

C:\Мои документы\gray.jpg

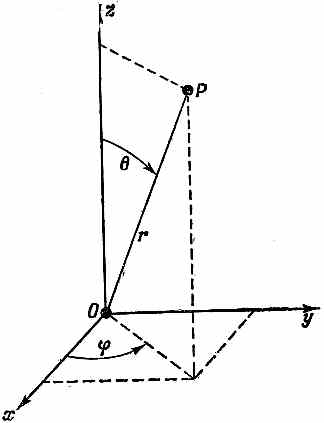
где *Е —* некоторое постоянное число (энергия атома).

Раз потенциальная энергия зависит только от радиуса, то это уравнение лучше решать в полярных координатах.

Лапласиан в прямоугольных координатах определялся так:

C:\Мои документы\gray.jpg

Вместо этого мы хотим воспользоваться координатами r,θ, ϕ, изображенными на фиг. 17.1.

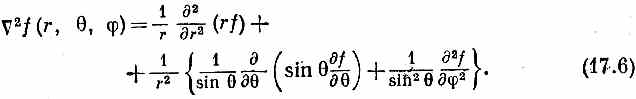


*Фиг. 17.1. Сферические ко­ординаты r, θ*, ϕ *точки Р.*

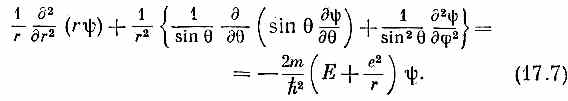
Они связаны с *х, у, z* форму­лами

*х*=*r*sinθcosϕ; *у=r*sinθsinϕ;  *z=r*cosθ.

Вас ждут довольно нудные алгебраические выкладки, но в конце концов вы должны будете прийти к тому, что для произвольной функции *f*(r) = *f*(*r*, θ, ϕ):



Итак, в полярных координатах уравнение, которому должна удовлетворять функция ψ(*r*, θ, ϕ), принимает вид



**§ 2.** **Сферически** **симметричные решения**

Попробуем сперва отыскать какую-нибудь функцию попроще, чтобы она удовлетворяла уравнению (17.7). Хотя волновая функция ψ в общем случае будет зависеть как от θ и ϕ, так и от r, можно все же поискать, не бывает ли такого особого случая, когда ψ *не* зависит от углов. Если волновая функция от углов не зависит, то при поворотах системы координат ни одна из амплитуд никак не будет меняться. Это означает, что все ком­поненты момента количества движения равны нулю. Такая функция ψ должна соответствовать состоянию с равным нулю полным моментом количества движения. (На самом деле, ко­нечно, равен нулю только орбитальный момент количества дви­жения, потому что остается еще спин электрона, но мы на эту часть момента не обращаем внимания.) Состояние с нулевым орбитальным моментом количества движения имеет особое на­звание. Его называют «s-состоянием» (можете считать, что *s* от слова «[сферически симметричный](#прим2)»).

Раз ψ не собирается зависеть от θ и ϕ, то в полном лапласиане останется только один первый член и (17.7) сильно упростится:

C:\Мои документы\gray.jpg

• Прежде чем заняться решением подобного уравнения, хорошо

; бы, изменив масштаб, убрать из него все лишние константы

вроде е2, *m, h.* От этого выкладки станут легче. Если сделать подстановки



то уравнение (17.8) обратится (после умножения на ρ) в

C:\Мои документы\gray.jpg

Эти изменения масштаба означают, что мы измеряем расстояние *r* и энергию *Е* в «естественных» атомных единицах. Например, ρ=*r/rB,* где *rB=h2/me*2*,* называется «боровским радиусом» и равно примерно 0,528 Å. Точно так же ε*=E/ER,* где *ER=me*4*/2h*2*.* Эта энергия называется «ридбергом» и равна примерно 13,6 *эв.* Раз произведение ρψ встречается в обеих частях уравнения, то лучше работать с ним, чем с самим ψ*.* Обозначив

ρψ=*f*, (17.12)

мы получим уравнение, которое выглядит проще:

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь нам предстоит найти функцию *f*, которая удовлет­воряет уравнению (17.13), иными словами, просто решить диф­ференциальное уравнение. К сожалению, не существует ника­ких общих, годных во всех случаях жизни методов решения любого дифференциального уравнения. Вы должны просто по­крутить его то так, то этак. Хоть уравнение не из легких, но лю­ди все же нашли, что его можно решить при помощи следующей процедуры. Первым делом вы заменяете *f*, которое является некоторой функцией от ρ, произведением двух функций:

C:\Мои документы\gray.jpg

Это просто означает, что вы выносите из *f*(ρ) множитель *е-αρ.* Для любого *f*(ρ) это можно сделать. Задача теперь просто све­лась к отысканию подходящей функции *g*(ρ).

Подставив (17.14) в (17.13), мы получим следующее уравне­ние для *g:*

C:\Мои документы\gray.jpg

Мы вправе выбрать любое α, поэтому сделаем так, чтобы было

α2=-ε; (17.16)

тогда получим

C:\Мои документы\gray.jpg

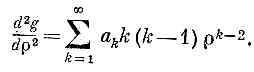
Вы можете подумать, что мы не так уж далеко ушли от урав­нения (17.13); но новое уравнение тем хорошо, что его можно легко решить разложением *g*(ρ) в ряд по ρ. В принципе есть возможность таким же способом решать и (17.13), но только все проходит сложнее. Мы говорим: уравнению (17.17) можно удов­летворить некоторой функцией *g*(ρ), которая записывается в виде ряда

C:\Мои документы\gray.jpg

где ak— постоянные коэффициенты. И нам осталось только найти подходящую бесконечную последовательность коэффициентов! Проверим, годится ли такая запись решения, Первая производ­ная такой функции *g*(ρ) равна

C:\Мои документы\gray.jpg

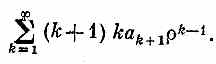
а вторая



Подставляя это в (17:17), имеем

C:\Мои документы\gray.jpg

Пока еще не ясно, вышло ли у нас что-нибудь; но мы рвемся вперед. Если мы первую сумму заменим некоторым ее эквива­лентом, то все выражение станет выглядеть лучше. Первый член в сумме равен нулю, поэтому каждое *k* можно заменить на *k*+1, от этого ничего в бесконечном ряде не изменится. Значит, пер­вую сумму мы вправе записать и так:



Теперь можно объединить все три суммы в одну:

C:\Мои документы\gray.jpg

Этот степенной ряд должен обращаться в нуль при всех мыслимых значениях ρ, что возможно лишь тогда, когда коэф­фициенты при каждой степени ρ порознь равны нулю. Мы полу­чим решение для атома водорода, если отыщем такую последо­вательность *ak,* для которой

C:\Мои документы\gray.jpg

при всех *k*>1. А это, конечно, устроить легко. Выберите какое угодно *а*1*.* Затем все прочие коэффициенты образуйте с помощью формулы

C:\Мои документы\gray.jpg

Пользуясь ею, вы получите *а*2, *а*3, *а*4 и т. д., и каждая пара будет, конечно, удовлетворять (17.21). Мы получим ряд для *g*(ρ), удовлетворяющий (17.17). С его помощью мы напишем ψ — решение уравнения Шредингера. Обратите внимание, что решения зависят от того, какова предполагаемая энергия (через α), но для каждого значения ε получается свой ряд. Решение-то у нас есть, но что оно представляет физически? Понятие об этом мы получим, поглядев, что происходит вдалеке от протона — при больших ρ. Там основное значение приобре­тают наивысшие степени членов ряда, т. е. нам надо посмотреть, что бывает при больших *k.* Когда k>>1, то уравнение (17.22) приближенно совпадает с :

C:\Мои документы\gray.jpg

а это означает, что

C:\Мои документы\gray.jpg

Но это как раз коэффициенты разложения в ряд е+2αρ. Функ­ция *g* оказывается быстро растущей экспонентой. Даже после умножения на *е-αρ* получающаяся функция *f*(ρ) [см. (17.14)] будет при больших ρ меняться как еαρ. Мы нашли математиче­ское решение, но оно не является физическим. Оно представляет случай, когда электрону *менее всего* вероятно очутиться вблизи протона! Чаще всего он вам повстречается на очень больших расстояниях р. А волновая функция для *связанного* электрона должна при больших ρ стремиться к нулю.

Придется подумать, нельзя ли как-нибудь обмануть решение. Оказывается, можно. Посмотрите! Если бы, по счастью, оказа­лось, что α*=*1*/n,* где *n —* любое целое число, то уравнение (17.22) привело бы к *a*n+1=0. И все высшие члены обратились бы тоже в нуль. Вышел бы не бесконечный ряд, а конечный многочлен. Любой многочлен растет медленнее, чем еαρ, поэтому множитель е-α наверняка забьет его при больших ρ, и функ­ция *f* при больших ρ будет стремиться к нулю. Единственные решения *для связанных состояний* это те, для которых α=1/n, где *n*=1, 2, 3, 4 и т. д.

Оглядываясь на уравнение (17.16), мы видим, что у сфериче­ски симметричного волнового уравнения могут существовать решения для связанных состояний лишь при энергиях

C:\Мои документы\gray.jpg

Допустимы только те энергии, которые составляют именно такую часть ридберга *ЕR=me*4*/2h*2*,* т. е. энергия *n*-го уровня равна

C:\Мои документы\gray.jpg

Кстати, ничего мистического в отрицательных энергиях нет. Они отрицательны просто потому, что когда мы решили писать *V= -е2/r,* то тем самым в качестве нуля энергии выбрали энергию электрона, расположенного вдалеке от протона. Когда он ближе, то его энергия меньше, т. е. ниже нуля. Энергия ни­же всего (самая отрицательная) при *n*=1и возрастает к нулю с ростом *п.*

Еще до открытия квантовой механики экспериментальное изучение спектра водорода показало, что уровни энергии описы­ваются формулой (17.24), где *ЕR,* как это следует из измерений, равно примерно 13,6 *зв.* Затем Бор придумал модель, которая привела к тому же уравнению (17.24) и предсказала, что *ER* должно равняться *me*4*/*2*h*2*.* Первым большим успехом теории Шредингера явилось то, что она смогла воспроизвести этот результат прямо из основного уравнения движения электрона.

Теперь, когда мы рассчитали наш первый атом, давайте рас­смотрим свойства полученного нами решения. Объединим все выделившиеся по дороге факторы и выпишем окончательный вид решения:

C:\Мои документы\gray.jpg

где

C:\Мои документы\gray.jpg

и

C:\Мои документы\gray.jpg

Пока нас интересует главным образом относительная вероят­ность обнаружить электрон в том или ином месте, можно в ка­честве *а*1выбирать любое число. Возьмем, например, *а*1=1*.* (Обычно выбирают *а*1так, чтобы волновая функция была «нор­мирована», т. е. чтобы полная вероятность обнаружить элек­трон где бы то ни было в атоме была равна единице. Мы в этом сейчас не нуждаемся.)

В низшем энергетическом состоянии *n*=1 и

C:\Мои документы\gray.jpg

Если атом водорода находится в своем основном (наиболее низ­ком энергетическом) состоянии, то амплитуда того, что элект­рон будет обнаружен в каком-то месте, экспоненциально падает с расстоянием от протона. Вероятнее всего встретить его вплотную близ протона. Характерное расстояние, на котором он встречается, составляет около одного ρ, или одного боровского радиуса *rB.*

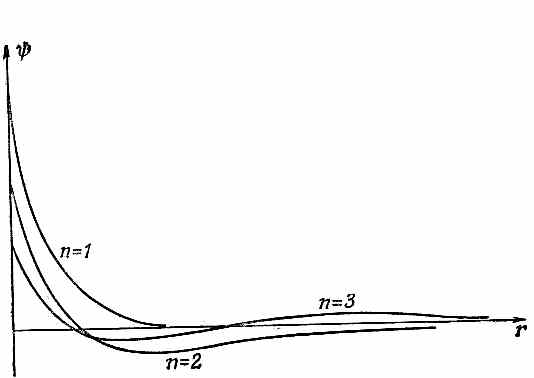
Подстановка *n*=2 дает следующий более высокий уровень. В волновую функцию этого состояния входят два слагаемых. Она равна

C:\Мои документы\gray.jpg

Волновая функция для следующего уровня равна

C:\Мои документы\gray.jpg

Эти три волновые функции начерчены на фиг. 17.2.



*Фиг. 17.2. Волновые функции трех первых состоя­ний атома водорода с l*=0. Масштабы *выбраны так, чтобы полные вероятности совпадали.*

Общая тен­денция уже видна. Все волновые функции при больших ρ, поко­лебавшись несколько раз, приближаются к нулю. И действи­тельно, число «изгибов» у ψ*n* как раз равно *n,* или, если угодно, число пересечений оси абсцисс — число нулей — равно *n-*1.

**§ 3. Состояния с угловой зависимостью**

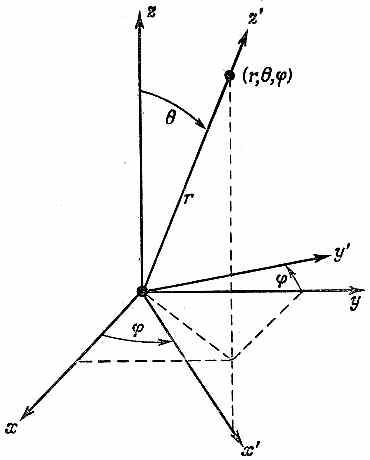
Мы нашли, что в состояниях, описываемых волновой функ­цией ψ*n*(*r*)*,* амплитуда вероятности обнаружить электрон сфе­рически симметрична; она зависит только от *r* — расстояния до протона. Момент количества движения таких состояний равен нулю. Теперь займемся состояниями, у которых какой-то момент количества движения имеется.

Можно было бы, конечно, просто исследовать чисто матема­тическую задачу отыскания функций от r, θ и ϕ, удовлетворяю­щих дифференциальному уравнению (17.7), добавив только физическое условие, что единственно приемлемые для нас функции — это такие, которые при больших r стремятся к нулю. Так почти всегда и поступают. Но мы попробуем несколько сократить наш путь и воспользоваться тем, что мы уже знаем, именно тем, что нам известно, как амплитуды зависят от про­странственных углов.

Атом водорода в том или ином состоянии — это частица с определенным «спином» *j* — квантовым числом полного мо­мента количества движения. Часть этого спина возникает от собственного спина электрона, другая — от движения электрона. Поскольку каждая из этих частей действует (в очень хорошем приближении) независимо, то мы по-прежнему будем игнориро­вать спиновую часть и учтем только «орбитальный» момент. Впрочем, это орбитальное движение в точности подобно спину. Скажем, если орбитальное квантовое число есть *l,* то *z*-компонента момента количества движения может быть *l*, *l-*1, *l*-2, . . ., -*l*. (Мы, как обычно, измеряем все в единицах *h*.) Кроме того, по-прежнему годятся все наши матрицы поворота и прочие известные свойства. (Начиная с этого места, мы *действительно* начнем пренебрегать спином электрона; говоря о «мо­менте количества движения», мы будем иметь в виду только орбитальную его часть.)

Поскольку поле с потенциалом *V,* в котором движется элект­рон, зависит только от *r,* а не от θ и не от ϕ, то гамильтониан симметричен относительно поворотов. Отсюда следует, что и момент количества движения и все его проекции сохраняются. Это не есть особое свойство кулонова потенциала *e*2*/r;* оно спра­ведливо при движении в *любом* «центральном поле» — поле, зависящем только от *r*.

Представим себе некоторое возможное состояние электрона; внутренняя угловая структура этого состояния будет опреде­ляться квантовым числом *l.* В зависимости от «ориентации» полного момента количества движения относительно оси *z* его проекция *т* на ось z может равняться одному из 2*l*+1 чисел между +*l* и -*l.* Пусть, например, *m*=1. С какой амплитудой электрон окажется на оси *z* на расстоянии *r* от начала? С нуле­вой. Электрон на оси z *не может* иметь какого-либо орбиталь­ного момента относительно этой оси. Но пусть тогда *m*=0. Вот это другое дело; теперь уже может появиться не равная нулю амплитуда того, что электрон окажется на оси z на таком-то расстоянии от протона. Обозначим эту амплитуду F*l*(*r*). Это — амплитуда того, что электрон будет обнаружен на расстоянии *r* по оси z, когда атом находится в состоянии | *l,* 0>, т. е. в состоянии с орбитальным моментом *l* и его *z*-компонентой *m=0.* А если нам известно *Fl*(*r*), то известно все. Теперь уже в лю­бом состоянии |*l, m*>мы можем узнать амплитуду ψ*lm (****r****)* того, что электрон обнаружится в *произвольном месте* атома. Как мы это узнаем? А вот следите. Пусть у нас есть атом в состоянии | *l, m*>*.* Какова амплитуда того, что электрон обнару­жится под углом θ, ϕ и на расстоянии *r* от начала? Проведите новую ось z, скажем z', под этим углом (фиг. 17.3) и задайте вопрос: какова амплитуда того, что электрон окажется на новой оси *z* на расстоянии *r*?



*Фиг. 17.3. Точка (х, у, z) лежит на оси z' системы координат х' , у', z'.*

Мы знаем, что он не сможет оказаться на оси z', если только *m* — его z'-компонента момента коли­чества движения — не равна нулю. Когда же *m'* =0, то амплитуда того, что электрон обнаружится на оси *z',* есть *Fl*(*r*). Значит, результат получится перемножением двух амплитуд. Первая это амплитуда того, что атом, находящийся в состоянии |*l, т*> относительно оси z, окажется в состоянии | *l, m'=*0> *относи­тельно оси z' .* Умножьте эту амплитуду на *Fl (r)* и вы получите амплитуду ψl,m(**r**) того, что электрон обнаружится в точке (*r*, θ, ϕ) относительно первоначальной системы осей.

Давайте все это распишем. Матрицы преобразования для поворотов мы уже вычислили. Чтобы перейти от системы *х, у, z к* системе *х', у', z'* (см. фиг. 17.3), можно сперва сделать поворот вокруг оси z на угол ϕ, а потом сделать поворот вокруг *новой* оси *у* (оси *у')* на угол θ. Совместный поворот выразится произведением

*Rу*(θ)*Rz*(ϕ).

Амплитуда того, что после поворота обнаружится состояние | *l*, *m'* =0>, есть

C:\Мои документы\gray.jpg

В итоге получаем

C:\Мои документы\gray.jpg

Орбитальное движение может обладать только целыми зна­чениями *l.* (Если электрон может быть обнаружен в любом месте, где *r≠*0*,* то имеется некоторая амплитуда того, что в этом на­правлении будет *m*=0. А состояния с *m*=0бывают только при целых спинах.) Матрицы поворота для *l*=1 приведены в табл.15.2 (стр. 129). Для больших *l* вы можете воспользоваться общими формулами, выведенными в гл. 16. Матрицы *Rz*(ϕ) и *Ry*(θ) написаны по отдельности, но как их комбинировать, вы знаете. В общем случае вы начнете с состояния | *l*, *m*> и подей­ствуете на него оператором *Rz*(ϕ), получив новое состояние *Rz*(ϕ)|*l, т*>(которое просто равно *eimϕ*|*l, m*>*)*. Затем вы подействуете на это состояние оператором *Ry*(θ) и получите состояние *Ry*(θ) *Rz*(ϕ) |*l*, *m*>. Умножение на <*l*, 0| даст вам матричный элемент (17.31).

Матричные элементы операции поворота — это алгебраиче­ские функции от θ и ϕ. Те частные виды функций, которые появляются в (17.31), возникают и во многих других задачах, связанных с волнами на сфере. Им присвоили особое имя. Правда, не у всех авторов обозначения одинаковы; чаще всего все же пишут

C:\Мои документы\gray.jpg

Функции *Yl,m*(θ, ϕ) называют *сферическими гармониками,* a *a* — просто численный множитель, который зависит от того, как определено *Yl,m.* При обычном определении

C:\Мои документы\gray.jpg

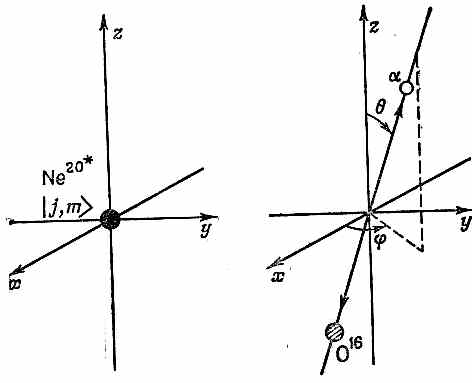
В этих обозначениях волновые функции водорода записываются так:

C:\Мои документы\gray.jpg

Угловые функции *Yl,m* (θ,ϕ) важны не только во многих квантовомеханических задачах, но и во многих областях клас­сической физики, в которых встречается оператор ∇2, например в электромагнетизме. В качестве другого примера их примене­ния в квантовой механике рассмотрим распад возбужденного состояния Ne20 (о котором говорилось в предыдущей главе), которое испускает α-частицу и превращается в О16:

Neao'^o^-fHe4.

Допустим, что возбужденное состояние имеет спин *l* (обяза­тельно целый), а *z*-компонента момента количества движения есть *т.* Спросим вот о чем: если даны *l* и *т,* токакова амплитуда того, что α-частица вылетит в направлении, составляющем с осью *z* угол θ и с плоскостью *xz* угол ϕ (фиг. 17.4)?

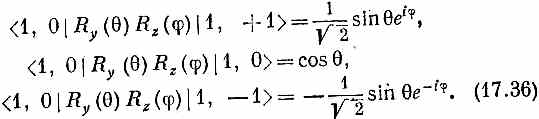


*Фиг. 17.4. Распад возбужденного состояния* Ne20.

Решить эту задачу нам поможет следующее наблюдение. Распад, в котором α-частица вылетает прямо вдоль оси z, должен происходить из состояния с *m=*0*.* Это потому, что у самих О16 и α-частицы спин равен нулю, а за счет движения вдоль оси z момента вокруг этой оси не создашь. Обозначим эту амплитуду *а* (на единицу телесного угла). Тогда, чтобы найти амплитуду распада под произвольным углом (см. фиг. 17.4), остается только узнать, с какой амплитудой данное начальное состояние будет обладать нулевым моментом относительно направления распада. Амплитуда того, что распад будет в направлении (θ, ϕ), тогда будет равна произведению *а* на амплитуду того, что состояние |*l, т*>относительно оси *z* окажется в состоянии |*l*, 0> отно­сительно *z'* (направления распада). Эта последняя амплитуда как раз и есть то, что мы писали в (17.31). Вероятность увидеть α-частицу под углом (θ, ϕ), стало быть, равна

C:\Мои документы\gray.jpg

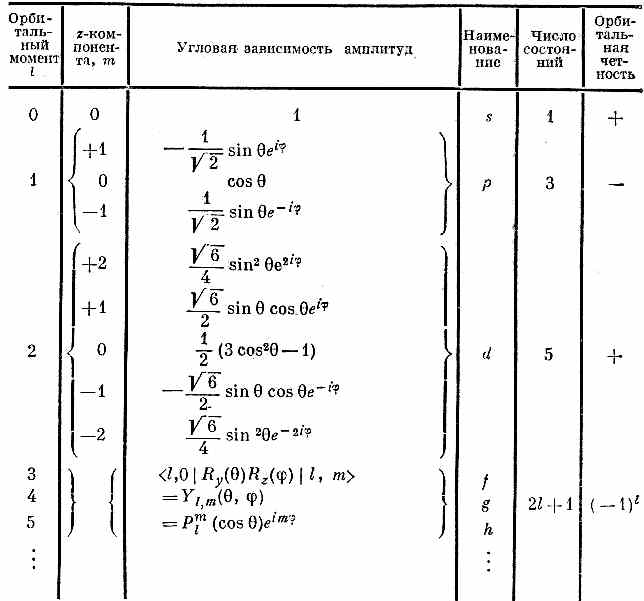
Для примера рассмотрим начальное состояние с *l*=1 и различными *т.* Из табл. 15.2 (стр. 129) мы знаем все нужные амплитуды:



Это и есть три возможные амплитуды угловых распределений, в зависимости от того, какое *т* у первоначального ядра.

Такие амплитуды, как (17.36), встречаются так часто и так важны, что им дали *несколько* названий. Если амплитуда углового распределения пропорциональна любой из этих трех функ­ций или любой их линейной комбинации, то мы говорим: «орби­тальный момент системы равен единице». Или можно сказать: «Ne20\* испускает *р*-волну». Или говорят: «α-частица испускается в состоянии с *l=*1*».* Выражений так много, что даже стоит соста­вить словарик. Если вы хотите понимать разговор физиков, то вам просто нужно выучить их язык. В табл. 17.1 приведен сло­варь орбитальных моментов количества движения.

*Таблица 17.1* • СЛОВАРИК ОРБИТАЛЬНЫХ МОМЕНТОВ (*l=j*-ЦЕЛЫЕ ЧИСЛА)



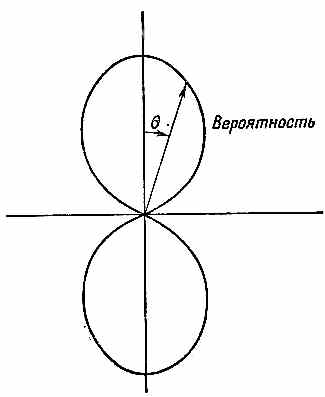
Если орбитальный момент равен нулю, то повороты системы координат ничего не меняют и зависимости от угла нет: «зави­симость» от угла имеет вид постоянной, скажем 1. Это называют «*s*-состоянием». Есть только одно такое состояние, пока дело касается только зависимости от угла. Если орбитальный момент равен 1, то амплитуда зависимости от углов может быть одной из трех приведенных функций, смотря по тому, чему равно *m,* или их линейной комбинацией. Их называют «*р*-состояниями».

Таких состояний три. Если орбитальный момент равен 2, то подобных функций пять (см. таблицу). Любая их линейная ком­бинация называется «*l*=2»-амплитудой, или амплитудой «*d*-волны». Теперь вы сразу догадаетесь, какая будет следующая буква. Что должно идти после s, *p, d?* Ну, конечно же, *f, g, h* ит. д. по алфавиту. Буквы эти ничего не значат. [Когда-то они что-то значили: «резкая» (sharp), «главная» (principal), «диффузная» (diffuse) и «фундаментальная» (fundamental) серии линий опти­ческого спектра атомов. Но это было тогда, когда еще не было известно, откуда эти серии линий берутся. После *f* особых названий уже не было, так что мы сейчас просто продолжаем *g, h* и т. д.]

Угловые функции в таблице проходят под несколькими име­нами и определяются порой с небольшими вариациями в числен­ных множителях, стоящих впереди. Иногда их называют «сфери­ческие гармоники» и обозначают *Yl,m* (θ,θ). Иногда их пишут *Рlm* (cosθ)*eimϕ, а* при *m=*0просто *Рl*(cosθ). Функции *Pl(cos*θ) называются «полиномы Лежандра» по cosθ, а функции *Plm*(cosθ) именуют «присоединенными функциями Лежандра». Таблицы этих функций встречаются во многих книгах.

Обратите, кстати, внимание, что все функции с данным *l* имеют одну и ту же четность — при нечетных *l* они от инвер­сии меняют свой знак, при четных *l* — нет. Поэтому можно на­писать, что четность состояния с орбитальным моментом *l* рав­на (-1*)l.*

Как мы видели, одни и те же угловые распределения мо­гут относиться к разным вещам: к ядерному распаду, к другим ядерным процессам, к распределению амплитуд наблюдения электрона в том или ином месте атома водорода. Например, если электрон находится в *р*-состоянии (*l*=1), то амплитуда того, что он обнаружится в каком-то месте, зависит от угла определен­ным образом, но всегда представляет собой линейную комби­нацию трех функций для *l=*1из табл. 17.1. Возьмем очень интересный случай cosθ. Он означает, что амплитуда, скажем, положительна в верхней части (θ<π/2), отрицательна в нижней (θ>π/2) и равна нулю при θ=90°. Возводя ее в квадрат, видим, что вероятность встретить электрон меняется с θ так, как пока­зано на фиг. 17.5, и не зависит от ϕ.



*Фиг. 17.5. График cos*2θ *в по­лярных координатах, дающий относительную вероятность об­наружения электрона под раз­личными углами к оси z (для дан­ного r) в состоянии атома с l=1 и m*=0.

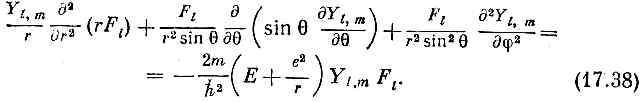
Такое угловое распределение ответственно за то, что в молекулярной связи притяже­ние электрона в состоянии *l=*1к другому атому зависит от направления. Отсюда ведет свое начало направленная валент­ность химического притяжения.

**§ 4. Общее** **решение для водорода**

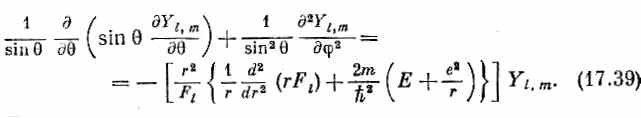
В уравнении (17.35) мы записали волновые функции ато­ма водорода в виде

C:\Мои документы\gray.jpg

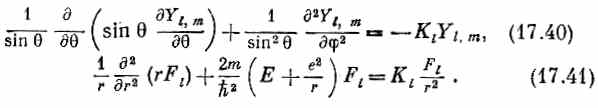
Эти волновые функции должны быть решениями дифференци­ального уравнения (17.7). Посмотрим, что это означает. Под­ставим (17.37) в (17.7); получим



Помножим все на *r*2*/Fl* и переставим члены; результат будет таков:



Левая часть этого уравнения зависит от θ и ϕ, а от *r* *не зависит.* Какое бы значение *r* мы ни взяли, от этого левая часть не изме­нится. Значит, *то же должно быть выполнено и для правой части.* Хотя в выражении в квадратных скобках там и сям попадаются разные *r,* все выражение от *r* зависеть не может, иначе бы не получилось уравнение, которое годится для всех *r.* Кроме того, как вы видите, эта скобка не зависит ни от θ, ни от ϕ. Она должна быть постоянным числом. Его величина имеет право зато зави­сеть от значения *l* того состояния, которое мы изучаем, поскольку этому состоянию принадлежит функция *Fl;* поэтому постоянное число мы обозначим *Kl.* Уравнение (17.35), стало быть, равно­значно двум уравнениям



Теперь взглянем на то, что мы сделали. Для каждого состоя­ния, описываемого числами *l* и *m,* мы знаем функции *Yl,m*; тогда из уравнения (17.40) можно определить *Kl* Затем, подставив *Kl* в (17.41), мы получим дифференциальное уравнение для функции *Fl (r).* Если мы его сможем решить, то все множители, входящие в (17.37), нам станут известны, и мы узнаем ψ(r).

Чему же равно *Кl*?Ну, во-первых, заметьте, что при всех *т* (входящих в данное *l)* оно должно быть одним и тем же, поэтому мы вправе выбрать в *Yl,m* то *m,* какое нам нравится, и вставить его в (17.40). Пожалуй, проще всего взять *Yl,l.* Из уравнения (16.24)

C:\Мои документы\gray.jpg

Матричный элемент *Ry*(θ) тоже совсем прост:

C:\Мои документы\gray.jpg

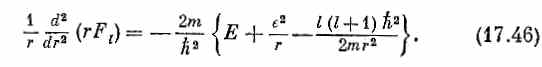
где *b —* [некоторое число](#прим3). Объединяя их, получаем

C:\Мои документы\gray.jpg

Подстановка этой функции в (17.40) даст

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь, когда мы определили *Кl,* уравнение (17.41) даст нам радиальную функцию *Fl (r).* Перед нами обычное уравнение Шредингера, у которого угловая часть заменена ее эквивален­том *KlFl/r2.* Перепишем (17.41) в той форме, в какой мы писали уравнение (17.8):



У потенциальной энергии появилась какая-то таинственная добавка. Хотя она появилась на свет после длинной серии мате­матических шагов, тем не менее у нее простое физическое проис­хождение. Мы беремся рассказать о ее происхождении при помощи полуклассических аргументов. После этого она уже не покажется вам такой таинственной.

Представим классическую частицу, вращающуюся вокруг некоторого силового центра. Полная энергия сохраняется и является суммой потенциальной и кинетической энергий

C:\Мои документы\gray.jpg

В общем случае *v* разлагается на радиальную компоненту *vr* и на касательную компоненту *r*θ, т. е.

*v*2*=v*2*r+*(*r*θ)2.

Момент количества движения *mr2*θтоже сохраняется; пусть он равняется *L.* Тогда можно написать

*mr*2θ=*L,* или *r*θ =*L/mr* ,

т. е. энергия равна

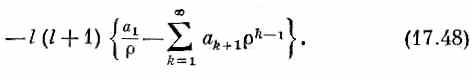
C:\Мои документы\gray.jpg

Если бы момента количества движения не было, у нас осталось бы только два первых члена. Добавление момента количества движения *L* изменяет энергию как раз так, как если бы к потен­циальной энергии добавился член *L*2*/*2*mr*2*.* Но он почти точно совпадает с добавкой (17.46). Единственная разница в том, что вместо ожидаемого числителя *l*2*h*2 (этого можно было бы ожидать) появляется комбинация *l*(*l*+1)*h*2 Но мы еще раньше видели [например, в гл. 34, § 7 (вып. 7)], что это обычная замена, к которой всегда приходится прибегать, если хотят, чтобы квази­классические рассуждения совпали с правильным квантовомеханическим расчетом. Поэтому новый член можно понимать как своего рода «потенциал», определяющий «центробежную силу» и возникающий в уравнениях радиального движения вращаю­щейся системы [см. гл. 12, § 5 (вып. 1)].

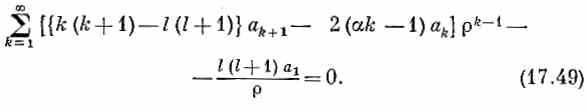
Теперь мы уже можем решить уравнение (17.46) относительно *Fl(r).* Оно очень похоже на (17.8), так что прибегнем к той же технике. Все повторяется вплоть до уравнения (17.19), в кото­ром появится добавочный член

C:\Мои документы\gray.jpg

Его можно записать еще и так:



(Мы выделили первый член, а затем текущий индекс *k* сдвинули на единицу.) Вместо (17.20) появится



Поскольку член с ρ-1 только один, то он должен обратиться в нуль. Коэффициент *a*1должен быть равен нулю (если только *l* не равно нулю, но тогда мы приходим к нашему прежнему реше­нию). А когда все квадратные скобки при любых *k* обратятся в нуль, то и все следующие члены станут равны нулю. Из-за этого условие (17.21) переходит в

C:\Мои документы\gray.jpg

Это единственное существенное видоизменение по сравнению со сферически симметричным случаем.

Как и раньше, ряд должен оборваться, если мы хотим, чтобы решения представляли связанные электроны. Если α*n*=1, то ряд оборвется на *k=n.* Условие на а получается таким же: *а* должно быть равно 1/*n*, где *n —* целое число. Однако (17.50) приводит и к новому ограничению. Индекс *k* не может быть равен *l*, в противном случае знаменатель обратится в нуль, а *аl+*1— в бесконечность. Иначе говоря, поскольку *a*1=0, то (17.50) подразумевает, что все последовательные *ak* обращаются в нуль, пока мы не придем к а*l*+1, которое может быть и не ну­лем. Это означает, что *k* должно начинаться с *l*+1 и кончаться

на *п.*

Окончательный итог таков: при любом *l* имеется набор возможных решений, которые мы обозначим *Fn,l,* где *n*>*l*+1. Каждое решение обладает энергией

C:\Мои документы\gray.jpg

Волновая функция состояния с такой энергией и с угло­выми квантовыми числами *l* и *m* имеет вид

C:\Мои документы\gray.jpg

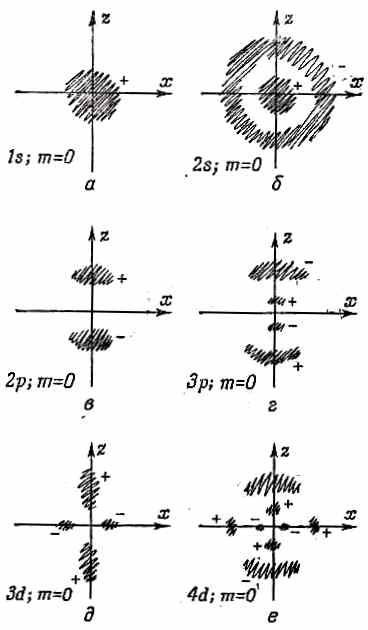
где

C:\Мои документы\gray.jpg

Коэффициенты *a*k получаются из (17.50). Наконец-то в наших руках полное описание состояний атома водорода.

**§ 5. Волновые функции водорода**

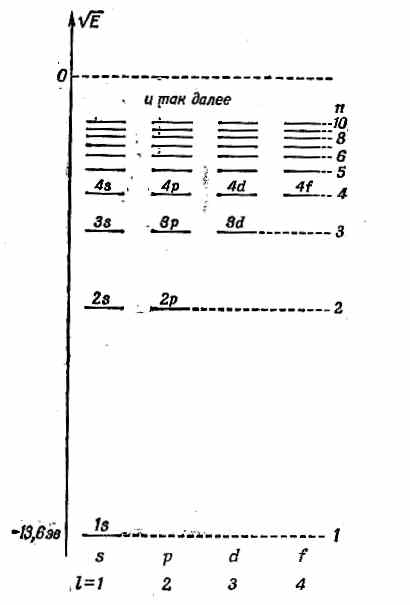
Посмотрим же, что мы открыли. Состояния, которые удов­летворяют уравнению Шредингера для электрона в кулоновом поле, характеризуются тремя (причем целыми) квантовыми числами *n, l, m.* Угловое распределение амплитуды электрона может обладать только определенными формами, которые мы обозначим *Yl,m.* Они нумеруются числом *l — квантовым числом полного момента количества движения я т* — *«магнитным» квантовым числом,* которое может меняться от -*l* до +*l*. При каждой угловой конфигурации возможны различные радиаль­ные распределения *Fn,l*(r) амплитуды электрона; они нумеруют­ся *главным квантовым числом n,* которое может меняться от *l*+1 до ∞*.* Энергия состояния зависит только от *n* и растет с *n.* Состояние наинизшей энергии, или основное, является *s*-состоянием. У него *l=*0*, n*=1 и *m=*0*.* Это «невырожденное» состояние: имеется только одно состояние с такой энергией, а волновая функция у него сферически симметрична. Амплитуда того, что электрон обнаружится, достигает максимума в центре и монотонно спадает с удалением от центра. Эту электронную амплитуду можно изобразить этаким комочком (фиг. 17.6,*а*).



*Фиг. 17.6. Наброски, отражающие общий харак­тер волновых функций водорода.*

В заштрихованных местах ам­плитуды велики. Знаки плюс и минус — это относительные знаки амплитуд в каждой об­ласти.

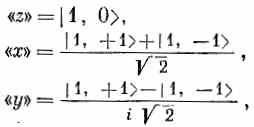
Имеются и другие s-состояния, с большими энергиями; у них *n*=2, 3, 4, ... и *l=*0*.* Каждой энергии соответствует толь­ко одно состояние *m=*0*,* и все они сферически симметричны. Амплитуды этих состояний с ростом *r* один или несколько раз меняют знак. Имеется *n-*1 сферических узловых поверхностей, или мест, где ψ проходит через нуль. Например, 2*s*-состояние (*l*=0, *n=*2*)* выглядит так, как показано на фиг. 17.6, *б.* (Темные области указывают те места, где амплитуда велика, а знаки плюс и минус отмечают относительные фазы амплитуды.) Уровни энергии s-состояний показаны в первом столбце фиг. 17.7.



*Фиг. 17.7. Диаграмма уров­ней энергии водорода.*

Затем бывают *р*-состояния с *l=*1*.* Для каждого *n (n* равно или больше 2) существует тройка состояний с одинаковой энергией, одно с *m*=+1, другое с *m*=0, третье с *m=-*1. Уровни энергии отмечены на фиг. 17.7. Угловые зависимости этих состояний приведены в табл. 17.1. Так, при *m=*0*,* если амплитуда положи­тельна для углов θ, близких к нулю, то при углах θ, близких к 180°, она окажется отрицательной. Имеется узловая плос­кость, совпадающая с плоскостью *ху.* При *n*>1 бывают также конические узловые по­верхности. Амплитуда *n*=2, *m*=0 намечена на фиг. 17.6,*в,* а волновая функция *n*=3, *m=*0 — на фиг. 17.6, *г.*

Могло бы показать­ся, что поскольку *т* дает, так сказать, «ори­ентацию» в простран­стве, то должны наблю­даться еще такие же распределения, но с пи­ками вдоль оси *х* или вдоль оси *у.* Можно по­думать, что это скорее всего состояния с *m*=+1 и с *m*=-1. Однако это не так! Но зато раз у нас есть тройка состояний с одинаковыми энер­гиями, то любая линейная комбинация из этой тройки тоже будет стационарным состоянием с той же энергией. Оказы­вается, что «*x*»-состояние (по аналогии с «*z*»-состоянием, или состоянием с *m*=0, см. фиг. 17.6, *в)* это линейная комбинация состояний с *m*=+1' и с *m*=-1. Другая комбинация дает «*y*»-состояние. Точнее, имеется в виду, что состояния



если отнести их к своим осям, выглядят одинаково.

У d-состояний (*l*=2) для каждой энергии есть пять возмож­ных значений *т;* наинизшей энергией обладает *n*=3. Уровни показаны на фиг. 17.7. Угловые зависимости усложняются. К примеру, состояния с *m*=0 обладают двумя коническими узловыми поверхностями, так что при переходе от северного по­люса к южному волновая функция меняет фазы с + на — и обратно на +. Примерная форма амплитуды нарисована на фиг. 17.6,*д* и *е* для состояний с *m*=0 и *n*=3 и 4. И снова при больших *n* появляются конические узловые поверхности.

Мы не будем пытаться описывать другие последующие со­стояния. Подробное изложение волновых функций водорода вы найдете во многих книгах. Рекомендую вам особенно; L. Pauling, E.B.Wilson, Introduction to Quantum Mechanics, New York, 1935; R. B. Leightоn. Principles of Modern Physics, New York, 1959. В этих книгах вы найдете графики некоторых функций и графическое изображение многих со­стояний.

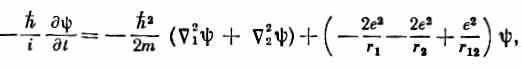
Хотелось бы упомянуть об одном особом свойстве волновых функций при высших *l:* при *l*>0 амплитуды обращаются в центре в нуль. Ничего в этом удивительного нет, ведь электрону трудно иметь большой момент, когда плечо момента очень мало. По этой причине чем *l* большe, тем дальше амплиту­ды «отталкиваются» от центра. Если вы посмот­рите, как радиальные функции *F(r)* меняются при малых *r*, то из (17.53) окажется, что

C:\Мои документы\gray.jpg

Такая зависимость от *r* означает, что при боль­ших *l* вам придется даль­ше отойти от *r*=0, чтобы получить заметную ампли­туду. Такое поведение, кстати, определяется чле­ном с центробежной силой в радиальном уравнении, так *что* все это применимо к любому потенциалу, который при малых *r* меняется медленнее, чем 1/r2, а таково большинство атомных потенциалов.

**§ 6. Периодическая таблица**

Теперь мы хотели бы применить теорию атома водорода к объяснению химической периодической таблицы элементов. В атоме элемента с атомным номером *Z* имеется *Z* электронов, которые удерживаются электрическим притяжением ядра, но при этом взаимно отталкиваются друг от друга. Чтобы полу­чить точное решение, пришлось бы решить уравнение Шредин­гера для *Z* электронов в кулоновом поле. Для гелия уравнение имеет вид



где ∇21 — лапласиан, который действует на r1, координату пер­вого электрона; ∇22 действует на r2, a *r*12*=|r*1*-*r2|. (Мы опять пренебрегаем спинами электронов.) Чтобы найти стационар­ные состояния и уровни энергии, следовало бы отыскать ре­шения вида

C:\Мои документы\gray.jpg

Геометрическая зависимость заключена в *f* — функции шести переменных — одновременных положений двух электронов. Аналитического решения никто не знает, хотя решения для низ­ших энергетических состояний и были найдены численными ме­тодами.

Когда электронов 3, 4 или 5, безнадежно пытаться получить точные решения. Поэтому было бы опрометчиво утверждать, что квантовая механика до конца объяснила периодическую таб­лицу. Но все же можно сказать, что даже с помощью довольно сомнительных приближений (и кое-какой последующей отделки) удается, по крайней мере качественно, понять многие хими­ческие свойства, проявляющиеся в периодической таблице.

Химические свойства атомов определяются в первую очередь их низшими энергетическими состояниями. Для отыскания этих состояний и их энергий мы воспользуемся следующей приближенной теорией. Во-первых, пренебрежем спином электрона, разве только что принцип запрета будет принят нами во вни­мание и мы будем считать, что каждое частное электронное состояние может быть занято только одним электроном. Это озна­чает, что на одной орбите не может оказаться больше *двух* электронов — один со спином, направленным вверх, другой — вниз. Затем мы в первом приближении пренебрежем *деталями* вза­имодействия электронов и будем считать, что каждый электрон движется в *центральном поле,* образуемом полями ядра и всех прочих электронов. Про неон, у которого 10 электронов, мы скажем, например, что каждый электрон в атоме неона испы­тывает влияние среднего потенциала ядра и оставшейся девятки электронов. Мы вообразим далее, что в уравнение Шредингера для каждого электрона мы подставляем *V*(*r*) *—* то же поле 1/*r*, но только видоизмененное за счет сферически симметричной плотности заряда, возникшей от остальных электронов.

В такой модели каждый электрон ведет себя как независи­мая частица. Угловые зависимости его волновой функции бу­дут попросту такими же, какие были у атома водорода. Это будут те же *s*-состояния, *р*-состояния и т. п., и у них будут раз­личные значения *т.* Раз *V*(*r*)больше не следует закону 1*/r,* то радиальная часть волновых функций слегка перекраивается, но качественно останется прежней, так что по-прежнему будет существовать радиальное квантовое число *п.* Энергии состоя­ний тоже станут немного иными.

**Н**

Что же при таких представлениях у нас получится с водо­родом? У основного состояния водорода *l=m=*0и *n*=1; мы говорим, что у него электронная конфигурация 1*s.* Энергия равна -13,6 *эв.* Это значит, что для отрыва электрона от атома нужно 13,6 *эв* энергии. Ее называют «энергией ионизации», *W*1*.* Большая энергия ионизации означает, что оторвать элект­рон трудно, но водород может отнять электрон у другого атома, а потому он химически активен.

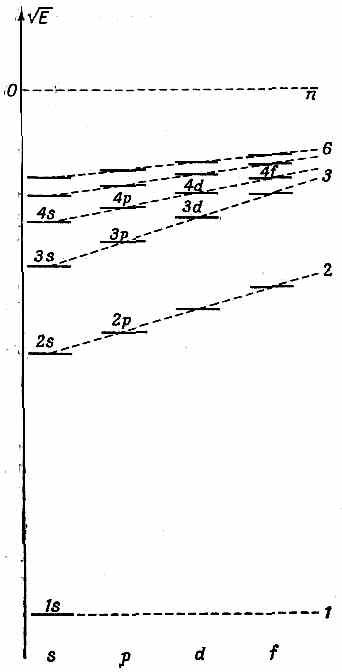
**Не**

Теперь обратимся к гелию. Оба электрона в гелии могут находиться в одном и том же нижнем состоянии (только у одного спин направлен вверх, у другого — вниз). В своем наинизшем состоянии электрон движется в поле с потенциалом, который при малых *r* походит на кулонов потенциал с Z=2, а при больших *r —* на кулонов потенциал с Z=1. В результате возникает «водородоподобное» 1*s*-состояние с несколько более низкой энер­гией. Оба электрона занимают одни и те же 1s-состояния (*l*=0, *m*=0). Наблюдаемая энергия ионизации (требуемая на отрыв *одного* электрона) равна 24,6 *эв.* Поскольку теперь «оболочка» 1*s* заполнена (больше двух электронов в нее не втиснешь), то практически не возникает тенденции уводить у других атомов электроны. Гелий химически инертен.

**Li**

Ядро лития имеет заряд 3. Состояния электрона опять бу­дут водородоподобны, и тройка электронов займет три нижних уровня энергии. Два по­падут в состояния 1*s,* a третий пойдет в состояние *n*=2. Но вот с *l*=0 или с *l*=1? В водороде у этих состояний энергия одна и та же, в других же атомах это не так, и вот по какой причине. Вспомним, что у 2*s*-состояния есть неко­торая амплитуда того, что оно окажется вблизи ядра, а у 2*р* такой амплитуды нет. Это означает, что 2*s*-электрон как-то ощутит тройной электрический заряд ядра Li, а 2*р*-электрон останется там, где поле выглядит как кулоново поле единичного заряда. Добавочное притя­жение понизит энергию 2*s*-состояния по сравнению с энер­гией 2*р*-состояния. Уровни энергии примерно окажутся такими, как показано на фиг. 17.8 (сравните с соответствующей диаграм­мой на фиг. 17.7 для водорода).

Поскольку разные *l*-состояния обладают разными энергиями, то каждое значение *l* отвечает некоторой подоболочке из 2(2*l*+1) возможных состояний (с различными *т* и различными направле­ниями спина). У всех у них энергия одинакова с точностью до некоторых слабых эффектов, которыми мы пренебрежем.



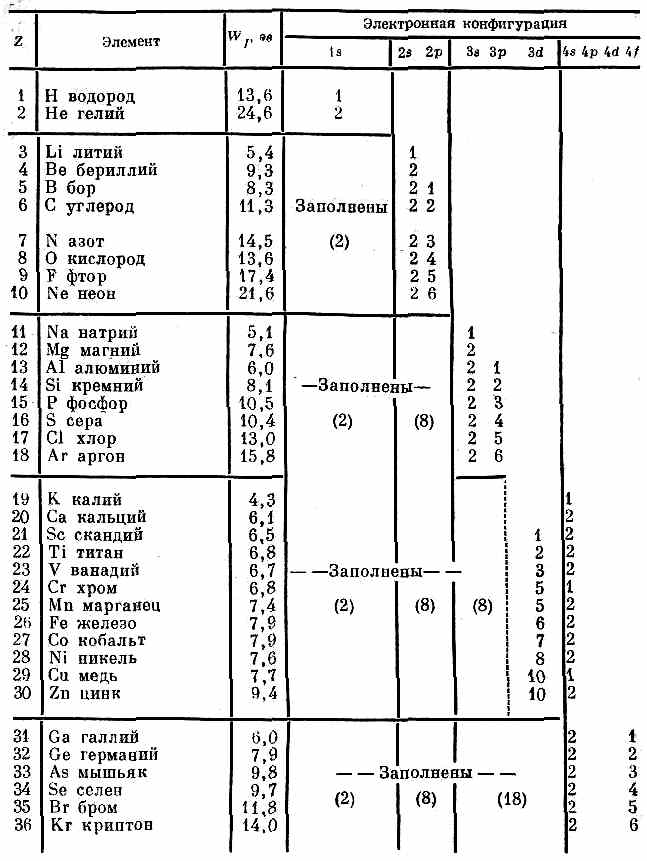
Фиг. 17.8. Схематическая диаграмма уровней анергии атомного электрона в присут­ствии других электронов. Масштаб иной, нежели па фиг. 17.7.

Значит, в атоме лития два элект­рона будут в 1*s*-состояниях, а один — в 2*s*-состоянии. Поскольку электрон в 2*s*-состоянии обладает более высокой энергией, чем электрон в 1s-состоянии, то его сравнительно легко удалить. Ионизационная энергия лития всего 5,4 *эв,* и он весьма активен химически.

Так постепенно перед вами развертывается вся картина; в табл. 17.2 мы привели список первых 36 элементов, отметив состояния, занимаемые электронами в основном состоянии каж­дого атома. Таблица дает энергию ионизации для наиболее слабо связанного электрона и количество электронов, занимающих каждую «оболочку», т. е. состояние с одним и тем же *п.*

*Таблица 17.2* • ЭЛЕКТРОННЫЕ КОНФИГУРАЦИИ ПЕРВЫХ

36 ЭЛЕМЕНТОВ (число электронов в разных состояниях)



Поскольку разные *l*-состояния обладают разными энергиями, то каждое значение *l* отвечает некоторой подоболочке из 2(2*l*+1) возможных состояний (с различными *m* и различными направле­ниями спина). У всех у них энергия одинакова с точностью до некоторых слабых эффектов, которыми мы пренебрежем.

Бериллий похож на литий, только у него в 2*s*-состоянии на­ходятся два электрона, а в заполненной 1s-оболочке тоже два.

**От В до Ne**

У бора 5 электронов. Пятый должен уйти в 2*p*-состояние. Всего бывает 2x3 = 6 разных 2*p*-состояний, поэтому можно продолжать добавлять по электрону, пока не дойдем до 8. Так мы доберемся до неона. Добавляя эти электроны, мы уве­личиваем также *Z,* поэтому все электронное распределение все теснее и теснее стягивается к ядру и энергия 2*p*-состояний все снижается и снижается, К тому времени, когда мы достигнем неона, энергия ионизации возрастет до 21,6 *эв.* Неон легко своего электрона не отдает. У него к тому же больше нет пустых мест на орбите, которые можно заполнить, так что и чужие электроны ему не нужны. Стало быть, неон химически инертен. У фтора есть пустое место, попав на которое, электрон может оказаться в состоянии с низкой энергией, поэтому в химиче­ских реакциях фтор очень активен.

**От Na** **до Ar**

В натрии одиннадцатый электрон вынужден начать новую оболочку, переходя в 3*s*-состояние. Уровень энергии этого состояния намного выше; энергия ионизации резко спадает; натрий химически очень активен. От натрия до аргона *s-* и *p*-состояния с *n=3* заполняются в той же последовательности, как от *лития* до неона. Угловые конфигурации электронов во внешней незаполненной оболочке идут в той же последователь­ности, и прогрессирующий рост энергии ионизации тоже весьма схож с тем, что было раньше. Вы теперь понимаете, почему хи­мические свойства с ростом атомного числа повторяются. Хи­мическое действие магния очень похоже на бериллий, кремния — на углерод, хлора — на фтор. Аргон, подобно неону, инертен. Быть может, вы уже обратили внимание на то, что в последо­вательности энергий ионизации от лития до неона есть неболь­шая особенность, и такая же особенность наблюдается между натрием и аргоном. Последний электрон прикреплен к атому кислорода чуть слабее, чем можно было ожидать. Тем же са­мым отличается сера. Отчего бы это? Это можно понять, если чуть внимательнее вдуматься в эффекты взаимодействия между электронами. Подумаем о том, что бывает, когда мы помещаем в атом бора первый 2*p*-электрон. Он имеет шесть возможностей — три возможных *р*-состояния, в каждом по два спина.

Представим, что электрон со спином вверх попадает в состоя­ние с *m=*0, которое мы также будем называть «*z*»-состоянием, потому что оно облегает ось *z.* Ну, а что произойдет в углероде? Теперь уже 2*p*-электронов два. Если один из них попал в «*z*»-состояние, то куда попадет второй? Ниже всего его энергия будет тогда, когда он расположится подальше от первого элект­рона. Этого можно достичь, попав, скажем, в «*x*»-состояние 2*p*-оболочки. (Это состояние, как вы помните,— просто линей­ная комбинация состояний с *m= +*1и с *m=-*1.) Дальше, когда мы перейдем к азоту, то у тройки 2*p*-электронов наимень­шая энергия взаимного отталкивания будет тогда, когда один из них попадет в «*x*»-конфигурацию, другой — в *«у»,* третий — в «z». Весь этот хоровод, однако, для кислорода не проходит. Четвертому электрону уже ничего не остается, как попасть в одно из заполненных состояний, держа при этом спин вниз. Тот элект­рон, который уже находится в этом состоянии, начнет его силь­но отталкивать, так что его энергия не будет такой низкой, ка­кой она была бы в противном случае, поэтому его легче будет удалить. Этим и объясняется разрыв в последовательности энер­гий связи, который появляется между азотом и кислородом, и между фосфором и серой.

**От К до Zn**

Можно было бы подумать, что за аргоном новые электроны начнут заполнять состояние *3d.* Но нет! Как мы уже говорили (и иллюстрировали фиг. 17.7), состояния с высшими моментами сдвинуты по энергии вверх. К моменту, когда мы подошли к 3*d*-состояниям, они по энергии оказываются задвинутыми нем­ножко выше энергии 4*s*-состояния. Поэтому в калии последний электрон попадет в 4*s*-состояние. После этого в кальции оболочка заполнится (двумя электронами), а З*d*-состояния начнут запол­няться у скандия, титана и ванадия.

Энергии 3*р-* и 4*s*-состояний так близки друг к другу, что ма­лозаметные эффекты легко сдвигают равновесие в ту или иную сторону. К моменту, когда придет время поместить в З*d*-состояния четыре электрона, их отталкивание так подымет энергию 4*s*-состояния, что она станет чуть выше энергии З*d*-состояния, поэтому один электрон из s уходит в *d.* И для хрома не полу­чается ожидавшаяся комбинация 4, 2, а вместо этого выступает комбинация *5,* 1. Новый электрон, добавляемый, чтобы полу­чить марганец, опять заполняет оболочку 4s и затем одно за другим идет заполнение З*d*-оболочки, пока мы не доберемся до меди.

Но так как самая внешняя оболочка марганца, железа, ко­бальта и никеля имеет одну и ту же конфигурацию, то все они обладают близкими химическими свойствами. (Этот эффект еще сильнее выражен у редкоземельных элементов. У них внешняя оболочка одинакова, а заполняется постепенно внутренняя ячейка, что меньше сказывается на их химических свойствах.) То же и в меди. В ней тоже построение З*d*-оболочки завер­шается грабежом: из 4*s*-оболочки уводится один электрон. Энергия комбинации 10, 1, однако, настолько близка у меди к энергии комбинации 9, 2, что равновесие может сместиться уже оттого, что поблизости стоит другой атом. По этой причине два последних электрона меди примерно равноценны, и валент­ность меди равна то 1, то 2. (Временами она проявляет себя так, как если бы ее электроны были в комбинации 9, 2.) Похо­жие вещи случаются и в других местах таблицы; они-то и от­ветственны за то, что другие металлы, такие, как железо, со­единяются химически то с той, то с другой валентностью. Нако­нец, у цинка обе оболочки *3d* и 4s заполняются раз и навсегда.

**От Ga до Kr**

От галлия до криптона последовательность опять продол­жается нормально, заполняя 4*p*-оболочку. Внешние оболочки, энергии и химические свойства повторяют картину изменений на участке от бора до неона и от алюминия до аргона.

Криптон, как и аргон или неон, известен как «благородный» газ. Все эти три «благородных» газа химически «[инертны](#прим4)». Это означает только то, что после того, как они заполнили обо­лочки со сравнительно низкими энергиями, редки будут случаи, когда им станет энергетически выгодно соединиться в простые сочетания с другими элементами. Но для «благородства» недо­статочно просто обладать заполненной оболочкой. У бериллия, например, или у магния заполнены s-оболочки, но энергия этих оболочек чересчур высока, чтобы можно было говорить об устойчивости. Точно так же можно было бы ожидать появления другого «благородного» элемента где-то возле никеля, если бы энергия у 3*d*-оболочки была бы чуть пониже (или у 4*s*-оболочки повыше). С другой стороны, криптон не вполне инертен; он об­разует с хлором слабо связанное соединение.

Поскольку в рассмотренной нами части таблицы уже про­явились все основные черты периодической системы, мы обры­ваем наше изложение на элементе № 36 (их остается еще штук 70, а то и больше!).

Мы хотим отметить еще один момент: мы в состоянии понять в какой-то степени не только валентности, но можем кое-что сказать и о направлениях химических связей. Возьмем такой атом, как кислород. В нем четыре 2*р*-электрона. Первые три попадают в состояния «*x*», «*у*» и «*z*», а четвертый вынужден заполнить одно из них, оставив два других — скажем, «*x*» и «*у*» — вакантными. Посмотрите теперь, что происходит в Н2O. Каждый из двух водородов желает разделить свой электрон с кислородом, помогая кислороду заполнить оболочку. Эти элек­троны будут стремиться попасть на вакансии в состояниях «*x*» и «*y*». Поэтому два водорода в молекуле воды обязаны располо­житься под прямым углом друг к другу, если смотреть из центра атома кислорода. На самом деле угол равен 105°. Можно даже понять, почему угол больше 90°. Обобществив свои электроны с кислородом, водороды остаются в конце концов с избытком положительного заряда. Электрическое отталкивание «растя­гивает» волновые функции и разводит угол до 105°. Так же об­стоит дело и у H2S. Но атом серы крупнее, атомы водорода ока­зываются дальше друг от друга, и угол расходится только до 93°. А селен еще крупнее, поэтому в H2Se угол уже совсем бли­зок к 90°.

Аналогичные рассуждения позволяют разобраться в гео­метрии аммиака H3N. В азоте есть место еще для трех 2*р*-электронов, по одному на каждое состояние типа «*x*», *«у»* и «*z*». Три водорода будут вынуждены подсоединиться под прямыми углами друг к другу. Углы снова окажутся чуть больше 90°, опять-таки из-за электрического отталкивания, но по крайней мере теперь ясно, отчего молекула H3N не плоская. Углы в фосфине Н3Р уже ближе к 90°, а в H3As еще ближе. Мы не зря предположили, что NH3 не плоский, когда говорили о нем как о системе с двумя состояниями. Именно из-за этой объемности аммиака и возможен аммиачный мазер. Вы видите, что сама форма молекулы аммиака тоже следует из квантовой механики. Уравнение Шредингера явилось одним из величайших триумфов физики. Снабдив нас ключом к механизму, лежащему в основе строения атома, оно объяснило атомные спектры и всю химию, благодаря чему стала понятна физическая природа материи.

***\* В действительности мнение об инертности благородных газов ока­залось, как и многое другое, сильным преувеличением. Криптон, напри­мер, весьма охотно соединяется с фтором, образуя кристаллы KrF6. Сейчас химия инертных газов превращается в большую и увлекательную науку.— Прим. ред.***

***\* Это нетрудно вывести из (16.35). Но можно это сделать, исходя из основных принципов; надо только воспользоваться идеями, изложенными в гл. 16, § 4. Состояние |l, l> может быть составлено из 2l частиц со спином 1/2, у которых спин направлен вверх; а в состоянии |l, 0> l спинов было бы направлено вверх, а l — вниз. При повороте амплитуда того, что спин останется тем же, равна cosθ/2, а амплитуда того, что он перевернется, равна sin θ/2. А нас интересует амплитуда того, что l спинов не перевер­нутся, а другие l перевернутся. Такая амплитуда равна (cosθ/2sinθ/2)l, а это то же самое, что sinlθ.***

\* Поскольку это и другие особые наименования являются частью общепринятого словаря атомной физики, вам попросту придется выучить их. Мы вам поможем их запомнить, поместив в этой главе небольшой «словарик» подобных терминов.

***\* Как обычно, ***

***Глава 18***

# ОПЕРАТОРЫ

**[§ 1. Опера](#a1)****[ции и операторы](#a1)**

[**§ 2. Средние** **энергии**](#a2)

[**§ 3. Средняя** **энергия** **атома**](#a3)

[**§ 4. Оп****ератор места**](#a4)

[**§ 5. Оператор и****мпульса**](#a5)

[**§ 6. Момент к****оли­чества движения**](#a6)

[**§ 7. Изменение средних с****о временем**](#a7)

**§ 1. Операции и операторы**

Для того чтобы управиться со всем, что мы до сих пор делали в квантовой механике, достаточно было бы обычной алгебры, но мы все же время от времени демонстрировали особые способы записи квантовомеханических величин и уравнений. Мы хотели бы рассказать теперь немного больше о некоторых интересных и по­лезных способах описания квантовомеханических величин.

К предмету квантовой механики можно подойти разными способами, и во многих книгах прибегают совсем к иному подходу, чем у нас. Когда вы начнете читать другие книжки, то может оказаться, что вам не удастся сразу связать то, что в них говорится, с тем, что де­лали мы. Хотя в этой главе мы и получим кое-какие новые результаты, она не похожа на дру­гие главы. У нее совсем иная цель: рассказать о других способах выражения тех же самых фи­зических представлений. Зная это, вы легче поймете, о чем говорится в других книжках. Когда люди впервые начали разрабатывать классическую механику, они неизменно распи­сывали свои уравнения через *х-, у-* и *z*-компоненты. Затем кто-то сделал шаг вперед в указал, что все можно упростить, введя век­торные обозначения. Правда, очень часто, чтобы представить себе задачу конкретнее, вы разбиваете векторы обратно на их компонен­ты. Но обычно все же куда легче делать расчеты и разбираться в существе дела, работая с век­торами. В квантовой механике нам тоже удалось упростить запись многих вещей, воспользовав­шись идеей «вектора состояния». Вектор состоя­ния |ψ> ничего общего, конечно, не имеет с геометрическими векторами в трехмерном пространстве; это просто отвлеченный символ, который обозначает *физиче­ское состояние,* отмечаемое своим «значком» или «назва­нием» ψ. Представление это весьма и весьма полезно, потому что на языке этих символов законы квантовой механики выглядят как алгебраические уравнения. К примеру, тот наш фундаментальный закон, что всякое состояние можно соста­вить из линейной комбинации базисных состояний, записы­вается так:

C:\Мои документы\gray.jpg

где *Сi* — совокупность обычных (комплексных) чисел, ампли­туд *Ci*=<i|ψ>, а |1>, |2>, |3> и т. д. обозначают базисные состояния в некотором базисе, или *представлении.*

Если вы берете какое-то физическое состояние и что-то про­делываете над ним (поворачиваете или ждете в течение времени *At* или еще что-то), то вы получаете уже другое состояние. Мы говорим: «производя над состоянием операцию, получаем новое состояние». Эту же идею можно выразить уравнением

C:\Мои документы\gray.jpg

Операция над состоянием создает новое состояние. *Оператор А* обозначает некоторую определенную операцию. Когда эта операция совершается над каким-то состоянием, скажем над |ψ>, то она создает какое-то другое состояние |ϕ>.

Что означает уравнение (18.2)? Мы *определяем* его смысл так. Умножив уравнение на <*i*| и разложив |ψ> по (18.1), вы получите

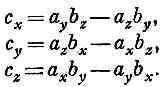
C:\Мои документы\gray.jpg

(|*j*> — это состояния из той же совокупности, что и |*i*>. Теперь это просто алгебраическое уравнение. Число <*i*|ϕ> показывает, какое количество базисного состояния |*i*> вы обнаружите в |ϕ>, и оно определяется через линейную суперпо­зицию амплитуд <*j*|ψ> того, что вы обнаружите |ψ> в том или ином базисном состоянии. Числа <*i|A*^|*j*> — это попросту коэф­фициенты, которые говорят, сколько (какая доля) состояния <*j*|ψ> входит в сумму. Оператор *А* численно описывается на­бором чисел, или «матрицей»

C:\Мои документы\gray.jpg

Значит, (18.2) это запись уравнения (18.3) на высшем уровне. А на самом деле даже немножко и сверх того: в нем подразуме­вается нечто большее. В (18.2) нет ссылки на ту или иную систе­му базисных состояний. Уравнение (18.3) — это образ уравнения (18.2) в некоторой системе базисных состояний. Но, как известно, система годится любая. Именно это и имеется в виду в (18.3). Операторная манера записи, стало быть, уклоняется от того или иного выбора системы. Конечно, если вам хочется определенности, вы вольны избрать *одну* из систем. И когда вы де­лаете этот выбор, вы пишете уравнение (18.3). Значит, *опера­торное* уравнение (18.2) — это более отвлеченный способ за­писи *алгебраического* уравнения (18.3). Это очень походит на разницу между записью

c=aXb и записью



Первый способ нагляднее. Но если вам понадобятся *числа,* вы наверняка зададите сперва компоненты относительно некоторой системы осей. Точно так же, если вы хотите дать понять, что за штука *А,* вам нужно быть готовыми задать матрицу *Аij* через *некоторую* совокупность базисных состояний. И пока вы имеете в виду определенную совокупность чисел *aij,* уравнение (18.2) означает то же, что и (18.3). (И нужно еще помнить, что если уж вы знаете матрицу для одной частной совокупности ба­зисных состояний, то всегда сможете подсчитать матрицу, соот­ветствующую любому другому базису. Матрицу всегда можно преобразовать от одного представления к другому.)

Операторное уравнение (18.2) допускает и другие возмож­ности. Если мы представили себе некоторый оператор *А,* то его можно применить к любому состоянию |ψ> и он создаст новое состояние *A^* |ψ>. Временами получаемое таким путем «состоя­ние» может оказаться очень своеобразным — оно может уже не представлять собой никакой *физической* ситуации, с которой можно встретиться в природе. (Например, может получиться состояние, которое не нормировано на вероятность получить один электрон.) Иными словами, временами мы можем получить «состояния», которые есть математически искусственные обра­зования. Эти искусственные «состояния» могут все равно ока­заться полезными, чаще всего в каких-либо промежуточных вы­числениях.

Мы уже приводили много примеров квантовомеханических операторов. Встречался нам оператор поворота *R*^у(θ), который, взяв состояние |ψ>, делает из него новое состояние, представ­ляющее собой старое состояние с точки зрения повернутой сис­темы координат. Встречался оператор четности (или инверсии) C:\Мои документы\gray.jpg

, создающий новое состояние обращением всех координат. Встре­чались и операторы σ*х,* σ*у* и σ*z* для частиц со спином 1/2.

Оператор *J*^z определялся в гл. 15 через оператор поворота на малые углы ε:

C:\Мои документы\gray.jpg

Это, конечно, попросту означает, что

C:\Мои документы\gray.jpg

В этом примере *J*^z|ψ> — это умноженное на *h/i*ε состояние, получаемое тоща, когда вы повернете |ψ> на малый угол ε и затем вычтете прежнее состояние. Оно представляет «состоя­ние», являющееся *разностью* двух состояний.

Еще один пример. Мы имели оператор *р^х,* он назывался опе­ратором (*x*-компоненты) импульса и определялся уравнением, похожим на (18.6). Если *D^x* (*L*) *—* оператор, который смещает состояние вдоль *х* на длину *L,* то *р^х* определялось так:

C:\Мои документы\gray.jpg

где δ — малое смещение. Смещение состояния |ψ> вдоль оси *х* на небольшое расстояние δ дает новое состояние |ψ'>. Мы го­ворим, что это новое состояние есть старое состояние плюс еще новый кусочек

C:\Мои документы\gray.jpg

Операторы, о которых мы говорим сейчас, действуют на вектор состояния, скажем на |ψ>, являющийся абстрактным описанием физической ситуации. Это совсем не то, что *алгебра­ические* операторы, действующие на математические функции. Например, *d/dx* это «оператор», действие которого на *f*(*x*)соз­дает из *f*(*x*)новую функцию *f'*(*x*)*=df/dx.* Другой пример ал­гебраического оператора — это ∇2. Можно понять, отчего в обоих случаях пользуются одним и тем же словом, но нужно помнить, что это разные типы операторов. Квантовомеханический оператор *А* действует *не* на алгебраическую функцию, а на вектор состояния, скажем на |ψ>. В квантовой механике употребляются и те и другие операторы, и часто, как вы уви­дите, в уравнениях сходного типа.

Когда вы впервые изучаете предмет, то все время надо иметь в виду эту разницу. А позднее, когда предмет вам станет ближе, вы увидите, что не так уж важно делать резкое различие между одними операторами и другими. И во многих книгах, как вы убедитесь, оба типа операторов обозначаются одинаково!

Теперь нам пора продвинуться вперед и узнать о мно­гих полезных вещах, которые можно проделывать с помощью операторов. Но для начала небольшое замечание. Пускай у нас имеется оператор *А^,* матрица которого в каком-то базисе есть *Aij=<i*|*A^*|*j*>. Амплитуда того, что состояние *A*^|ψ> находится также в некотором другом состоянии |ϕ>, есть <ϕ|*A*^|ψ>. Имеет ли смысл комплексное сопряжение этой амплитуды? Вы, вероятно, сможете показать, что

C:\Мои документы\gray.jpg

где *А^+* (читается «А с крестом») это оператор, матричные эле­менты которого равны

*A+ij*=(*Aji*)\*. (18.9)

Иначе говоря, чтобы получить *i, j*-и элемент матрицы *А+,* вы обращаетесь к *j,* *i*-му элементу матрицы *А* (индексы пере­ставлены) и комплексно его сопрягаете. Амплитуда того, что состояние *А^+*|ϕ> находится в состоянии |ψ>, комплексно сопряжена амплитуде того, что *А^*|ψ> находится в |ϕ>. Опера­тор *А^+* называется «эрмитово сопряженным» оператору *А^.* Мно­гие важные операторы квантовой механики имеют специальное свойство: если вы их эрмитово сопрягаете, вы опять возвращае­тесь к тому же оператору. Если *В* как раз такой оператор, то *В^+=В^*;его называют «самосопряженным», или «эрмитовым», оператором.

**§ 2. Средние энергии**

До сих пор мы в основном напоминали вам о том, что вы уже знаете. А теперь перейдем к новому. Как бы вы подсчитали *среднюю* энергию системы, скажем, атома? Если атом находится в определенном состоянии с определенной энергией и вы эту энергию измеряете, то вы получите определенную энергию *Е.* Если вы начнете повторять измерения с каждым из множества атомов, которые отобраны так, чтобы быть всем в одинаковом состоянии, то все измерения дадут вам *Е,* и «среднее» изо всех ваших измерений тоже, конечно, окажется *Е.*

Но что случится, если вы проделаете свои измерения над состоянием |ψ>, которое *не является* стационарным? Раз у си­стемы нет определенной энергии, то одно измерение даст одну энергию, то же измерение над другим атомом в том же состоя­нии даст другую и т. д. Каким же окажется среднее всей серии измерений энергии?

На этот вопрос мы ответим, если возьмем проекцию состоя­ния |ψ> на систему состояний с определенной энергией. Чтобы помнить, что это особый базис, будем обозначать эти состояния |η*i*>. Каждое из состояний |η*i*> обладает определенной энер­гией *ei,* В этом представлении

C:\Мои документы\gray.jpg

Когда вы проделываете измерение энергии и получаете некото­рое число *Еi,* вы тем самым обнаруживаете, что система была в состоянии |η*i*>. Но в каждом новом измерении вы можете получить новое число. Иногда вы получите *E*1*,* иногда *Е*2*,* иногда *Е*3и т. д. *Вероятность,* что вы обнаружите энергию *E*1? равна попросту вероятности обнаружить систему в состоянии |η1>, т. е. квадрату модуля амплитуды *С*1=<η1|ψ>. Вероятность обнаружить то или иное возможное значение энергии *Ei* есть

*Pi=*|*Ci*|2. (18.11)

Как же связать эти вероятности со средним значением всей последовательности измерений энергий? Вообразим, что мы получили ряд результатов измерений, например *E*1*, Е*7*, E*11*, Е*9*, E*1, *E*10*, Е*7*, E*2*, Е*3*, Е*9*, Е*6*, E*4и т. д., всего тысяча измерений. Сложим все энергии и разделим на 1000. Это и есть среднее. Можно сложение проделать и покороче. Посчитайте, сколько раз у вас вышло *E*1(скажем, оно вышло *N*1раз), сколько раз вышло *Е*2(скажем, *N*2раз) и т. д. Ясно, что сумма всех энер­гий равна

C:\Мои документы\gray.jpg

Средняя энергия равна этой сумме, деленной на полное число измерений, т. е. на сумму всех *Ni,* которую мы обозначим *N:*



Мы почти у цели. Под вероятностью какого-нибудь собы­тия мы *понимаем* как раз число случаев, когда ожидается на­ступление этого события, деленное на общее число испытаний. Отношение *Ni/N* должно (при больших *N)* мало отличаться от *Pi—* вероятности обнаружить состояние |η*i*>, хоть и не будет точно совпадать с *Рi* из-за статистических флуктуации. Обозначим предсказываемую (или «ожидаемую») среднюю энер­гию <*E*>ср; тогда мы вправе сказать

C:\Мои документы\gray.jpg

Те же рассуждения подойдут к измерениям каких угодно вели­чин. Среднее значение измеряемой величины *А* должно равняться

C:\Мои документы\gray.jpg

где *ai—*различные допустимые значения наблюдаемой вели­чины, а *Рi —* вероятность получения этого значения.

Вернемся теперь к нашему квантовомеханическому состо­янию |ψ>. Его средняя энергия равна

C:\Мои документы\gray.jpg

А теперь следите внимательно! Сначала перепишем эту сумму так:

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь будем рассматривать левое <ψ| как общий множитель.

Вынесем его за знак суммы и напишем

C:\Мои документы\gray.jpg

Это выражение имеет вид <ψ|ϕ>, где |ϕ> — некоторое «придуманное» состояние, определяемое равенством

C:\Мои документы\gray.jpg

Иными словами, это то состояние, которое у вас получится, если вы возьмете каждое базисное состояние |η*i*> в количестве

*Еi*<η*i*|ψ>.

Но вспомним теперь, что такое |η*i*>. Состояния |η*i*> считаются стационарными, т. е. для каждого из них

C:\Мои документы\gray.jpg

А раз *Еi—*просто число, то правая часть совпадает с |η*i*>*Еi,* а сумма в (18.16) — с

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь приходится просуммировать по *i* общеизвестную комби­нацию, приводящую к единице:

C:\Мои документы\gray.jpg

Чудесно, уравнение (18.16) совпало с

C:\Мои документы\gray.jpg

Средняя энергия состояния |ψ> записывается, стало быть, в очень привлекательном виде

C:\Мои документы\gray.jpg

Чтобы получить среднюю энергию, подействуйте на |ψ> опе­ратором *Н^* и затем умножьте на <ψ|. Очень простой результат. Наша новая формула для средней энергии не только прив­лекательна, но и полезна. Теперь нам уже не надо ничего го­ворить об особой системе базисных состояний. И даже всех уровней энергии знать не нужно. При расчете достаточно вы­разить наше состояние через *какую угодно* совокупность базис­ных состояний, и, если мы знаем гамильтонову матрицу *Нij* для *этой* совокупности, мы уже сможем узнать среднюю энер­гию. Уравнение (18.18) говорит, что при *любой* совокупности базисных состояний |*i*> средняя энергия может быть вычисле­на из

C:\Мои документы\gray.jpg

где амплитуды <*i|H*|*j*> как раз и есть элементы матрицы *Hij*. Проверим это на том частном примере, когда состояния |*i*> суть состояния с определенной энергией. Для них *H*^|*j*>=*e*|*j*>, так что <*i*|*H*^|*j*>=*Ejδij* и

C:\Мои документы\gray.jpg

что вполне естественно.

Уравнение (18.19) можно, кстати, обобщить и на другие физические измерения, которые вы в состоянии выразить в виде оператора. Например, пусть *L^z* есть оператор *z*-компоненты момента количества движения **L**. Средняя *z*-компонента для со­стояния |ψ> равна

C:\Мои документы\gray.jpg

Один из способов доказательства этой формулы — придумать такую задачу, в которой энергия пропорциональна моменту ко­личества движения. Тогда все рассуждения просто повторятся. Подытоживая, скажем, что если физически наблюдаемая величина *А* связана с соответствующим квантовомеханическим оператором *А^,* то среднее значение *А в* состоянии |ψ> дается формулой

C:\Мои документы\gray.jpg

Под этим подразумевается

C:\Мои документы\gray.jpg

где

C:\Мои документы\gray.jpg

**§ 3. Средняя энергия атома**

Пусть мы хотим узнать среднюю энергию атома в состоянии, описываемом волновой функцией ψ(**r**); как же ее найти? Рассмот­рим сперва одномерную задачу, когда состояние |ψ> опреде­ляется амплитудой <*x*|ψ>=ψ (*x*). Нас интересует частный слу­чай применения уравнения (18.19) к координатному представ­лению. Следуя нашей обычной процедуре, заменим состояния |*i*> и |*j*> на |*х*>и |*х'*>и сумму на интеграл. Мы получим

C:\Мои документы\gray.jpg

Этот интеграл можно при желании записывать иначе:

C:\Мои документы\gray.jpg

где

C:\Мои документы\gray.jpg

Интеграл по *х'* в (18.25) тот же самый, что встречался нам в гл. 14 [см. (14.50) и (14.52)]. Он равен

*C:\Мои документы\gray.jpg*

Поэтому можно написать

C:\Мои документы\gray.jpg

Вспомним, что <ψ|*x*>=<*x*|ψ>\*=ψ\*(*x*); с помощью этого равенства среднее значение энергии в (18.23) можно записать в виде

C:\Мои документы\gray.jpg

Если волновая функция ψ (*x*) известна, то, взяв этот интеграл, вы получите среднюю энергию. Вы теперь начинаете понимать, как от представлений о волновом векторе можно перейти к пред­ставлению о волновой функции и обратно.

Величина в фигурных скобках в (18.27) это *алгебраический* оператор. [«Оператор» *V(x)* означает «умножь на *V*(*x*)*».*]Мы обоз­начим его C:\Мои документы\gray.jpg

C:\Мои документы\gray.jpg

В этих обозначениях (18.23) превращается в

C:\Мои документы\gray.jpg

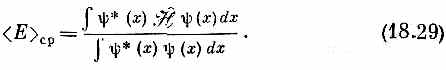
Определенный здесь алгебраический операторC:\Мои документы\gray.jpg*,* конечно, не тождествен с квантовомеханическим оператором *Н^.* Новый оператор действует на функцию координаты ψ(*x*)=<*x*|ψ>, об­разуя новую функцию от *х,* ϕ(*x*)=<*x*|ϕ>, а *H*^ действует на век­тор состояния |ψ>, образуя другой вектор состояния |ф>, причем не имеется в виду ни координатное, ни вообще какое-либо частное представление. Мало того, даже в координатном представлении C:\Мои документы\gray.jpgне совсем то же, что *Н^.* Если бы мы решили работать в координатном представлении, то смысл оператору *H*^ пришлось бы придавать с помощью матрицы <*x|H*^|*x*'>, кото­рая как-то зависит от двух «индексов» *x* и *x*'; иначе говоря, сле­довало бы ожидать, что [как утверждает (18.25)] <*x*|ϕ> свя­зано со всеми амплитудами <*x*|ψ> операцией интегрирования. А с другой стороны, мы нашли, что C:\Мои документы\gray.jpg *—* это дифференциальный оператор. Связь между <*x*|*H*^|*х'*> и алгебраическим оператором C:\Мои документы\gray.jpg

мы уже выясняли в гл. 14, § 5.

Наши результаты нуждаются в одном уточнении. Мы пред­положили, что амплитуда ψ (*x*)=<*x*|ψ> нормирована, т, е. мас­штабы выбраны так, что

C:\Мои документы\gray.jpg

и вероятность увидеть электрон *все равно где* равна единице. Но вы могли бы, если бы захотели работать с ненормирован­ной ψ (*х*)*,* следовало бы только писать



Это одно и то же.

Обратите внимание на сходство между (18.28) и (18.18). Оба эти способа записи одного и того же результата при работе в *x*-представлении часто встречаются. От первого можно пе­рейти ко второму, если *А^ — локальный* оператор, т. е. такой, для которого интеграл

C:\Мои документы\gray.jpg

может быть записан в видеC:\Мои документы\gray.jpg, где C:\Мои документы\gray.jpg *—* дифференциальный алгебраический оператор. Однако встречаются операторы, для которых это неверно. Тогда приходится работать с ис­ходными уравнениями (18.21) и (18.22).

Наш вывод легко обобщается на три измерения. Итог [таков](#прим1):

C:\Мои документы\gray.jpg

где

C:\Мои документы\gray.jpg

причем подразумевается, что

C:\Мои документы\gray.jpg

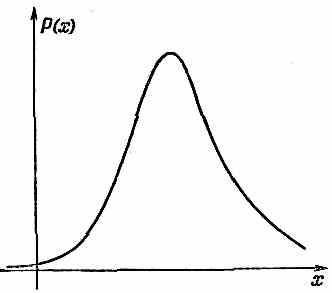
Такие же уравнения получаются довольно очевидным образом и при обобщении на системы с несколькими электронами, но мы не будем сейчас заниматься выписыванием результатов.

С помощью (18.30) можно рассчитать среднюю энергию атомного состояния, даже не зная уровней энергии. Нужна только волновая функция. Это очень важный закон. Расскажем об одном интересном его применении. Пусть вам нужно узнать энергию основного состояния некоторой системы, скажем ато­ма гелия, но вы затрудняетесь решить уравнение Шредингера для волновой функции из-за большого числа переменных. Поло­жим, однако, что вы решили попробовать какую-то волновую функцию (выбрав ее по своему желанию) и подсчитать среднюю энергию. Иначе говоря, вы пользуетесь уравнением (18.29), обобщенным на три измерения, чтобы узнать, какова была бы средняя энергия, если бы атом был на самом деле в состоянии, описываемом этой волновой функцией. Эта энергия, бесспорно, окажется выше энергии основного состояния — самой низкой энергии, какую может [иметь атом](#прим2). Возьмем теперь новую функцию и вычислим новую среднюю энергию. Если она ниже, чем было при первом вашем выборе, значит, вы подошли ближе к истинной энергии основного состояния. Если вы немного поразмыслите, вы, конечно, начнете пробовать такие функции, в которых есть несколько свободных параметров. Тогда энергия выразится через эти параметры. Варьируя параметры так, что­бы получить наинизшую мыслимую энергию, вы тем самым пере­пробуете за один раз целый класс функций. Скорее всего вы обнаружите, что понижать энергию становится все труднее и труднее, т. е. начнете убеждаться в том, что уже довольно близко подошли к наинизшей возможной энергии. Именно так и был решен атом гелия — никаких дифференциальных урав­нений не решали, а составили особые функции со множеством поддающихся подгонке параметров, которые были подобраны так, чтобы дать средней энергии наинизшее значение.

**§ 4. Оператор места**

Каково среднее местоположение электрона в атоме? В данном состоянии |ψ> каково среднее значение координа­ты *х*?Разберем одномерный случай, а обобщение на трех­мерный или на системы с большим числом частиц останется на вашу долю. Мы имеем состояние, описываемое функцией ψ (*x*)*,* и продолжаем раз за разом измерять *х.* Что получится в среднем? Очевидно, ∫*xP*(*x*)*dx,* где *Р*(*х*)*—*вероятность обнаружить

электрон в небольшом элементе длины *dx* возле *х.* Пусть плот­ность вероятности *Р*(*х*)меняется с *х* так, как показано на фиг. 18.1.



Фиг. 18.1. Кривая плотно­сти вероятности, представ­ляющей локализованную час­тицу.

Вероятнее всего вы обнаружите электрон где-то возле вершины кривой. Среднее значение *х* тоже придется куда-то на область невдалеке от вершины, а точнее, как раз на центр тяжести площади, ограниченной кривой.

Мы видели раньше, что *P*(*x*)*=*| ψ (*x*)|2*=*ψ*\**(*x*) ψ(*х*)*,* значит, среднее *х* можно записать в виде

C:\Мои документы\gray.jpg

Наше уравнение для <*x*>ср имеет тот же вид, что (18.18). Когда мы считали среднюю энергию, мы ставили между двумя ψ операторC:\Мои документы\gray.jpg*,* а когда считаем среднее положение, ставим про­сто *х.* (Если угодно, можете рассматривать *х* как алгебраиче­ский оператор «умножь на *х».*)Эту параллель можно провести еще дальше, выразив среднее местоположение в форме, которая соответствует уравнению (18.18). Предположим, что мы просто написали

C:\Мои документы\gray.jpg

где

C:\Мои документы\gray.jpg

и смотрим, не удастся ли найти такой оператор *х,* чтобы он создавал состояние |α>, при котором уравнение (18.34) не противоречит уравнению (18.33). Иначе говоря, мы должны найти такое |α>, чтобы было

C:\Мои документы\gray.jpg

Разложим сперва <ψ|α> по *x*-представлению:

C:\Мои документы\gray.jpg

Сравним затем интегралы в (18.36) и (18.37). Вы видите, что в *х-представлении* (и *только* в этом представлении)

C:\Мои документы\gray.jpg

Воздействие на |ψ> оператора *х^* для получения |α> равнознач­но умножению ψ (*x*)=<*x*|ψ> на *х* для получения α (*х*)=<*x*|α>. Перед нами определение оператора *х^* в координатном [представ­лении](#прим3).

(Мы не задавались целью получить *x*-представление матрицы оператора *х^.* Если вы честолюбивы, попытайтесь показать, что

C:\Мои документы\gray.jpg

Тогда вы сможете доказать поразительную формулу

C:\Мои документы\gray.jpg

т. е. что оператор *х^* обладает интересным свойством: когда он действует на базисное состояние |*x*>, то это равнозначно умножению на *х.*)

А может, вы хотите знать среднее значение *x*2? Оно равно

C:\Мои документы\gray.jpg

Или, если желаете, можно написать и так:

C:\Мои документы\gray.jpg

где

C:\Мои документы\gray.jpg

Под *x*^2 подразумевается *х^х^ —* два оператора применяются друг за другом. С помощью (18.42) можно подсчитать <*x*2>ср, пользуясь каким угодно представлением (базисными состоя­ниями). Если вам нужно знать среднее значение *хn* или любого многочлена по *х,* то вы легко это теперь проделаете.

**§ 5. Оператор импульса**

Теперь мы хотим рассчитать средний *импульс* электрона, опять начав с одномерного случая. Пусть *Р*(*р*)*dp —* вероят­ность того, что измерение приведет к импульсу в интервале между *р* и *p+dp.* Тогда

C:\Мои документы\gray.jpg

Обозначим теперь через <*р*|ψ> амплитуду того, что состоя­ние |ψ> есть состояние с определенным импульсом |*р*>. Это та же самая амплитуда, которую в гл. 14, § 3, мы обозначали <имп.*р*|ψ>; она является функцией от *р,* как <*x*|ψ> является функцией от *х.* Затем мы выберем такую нормировку амплитуды, чтобы было

C:\Мои документы\gray.jpg

Тогда получится

C:\Мои документы\gray.jpg

что очень похоже на то, что мы имели для <*x*>ср.

При желании можно продолжить ту же игру, которой мы предавались с <*x*>ср. Во-первых, этот интеграл можно записать так:

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь вы должны узнать в этом уравнении разложение амплитуды <ψ|β> — разложение по базисным состояниям с определенным импульсом. Из (18.45) следует, что состояние |β> определяется *в импульсном представлении* уравнением

C:\Мои документы\gray.jpg

Иначе говоря, теперь можно писать

C:\Мои документы\gray.jpg

причем

C:\Мои документы\gray.jpg

где оператор *р^* определяется на языке *p*-представления урав­нением (18.47).

[И опять при желании можно показать, что матричная запись *р^* такова:

C:\Мои документы\gray.jpg

и что

C:\Мои документы\gray.jpg

Выводится это так же. как и для *х.*

Теперь возникает интересный вопрос. Мы можем написать <*р*>ср так, как мы это сделали в (18.45) и (18.48); смысл опе­ратора *р^* в *импульсном представлении* нам тоже известен. Но как истолковать *р^* в *координатном представлении?* Это бывает нужно знать, если у нас есть волновая функция ψ (*x*)и мы со­бираемся вычислить ее средний импульс. Позвольте более четко пояснить, что имеется в виду. Если мы начнем с того, что за­дадим <*p*>cp уравнением (18.48), то это уравнение можно бу­дет разложить по *p*-представлению и вернуться к (18.45). Если нам задано *p*-представление состояния, а именно амплитуда <*p*|ψ> как алгебраическая функция импульса *p*, то из (18.47) можно получить <*p*|β> и продолжить вычисление интеграла. Вопрос теперь в следующем: а что делать, если нам задано описание состояния в *x*-представлении, а именно волновая функ­ция ψ (*x*)=<*x*|ψ>?

Ну что ж, начнем раскладывать (18.48) в *x*-представлении.

Напишем

C:\Мои документы\gray.jpg

Но теперь надо знать другое: как выглядит состояние |β> в *x*-представлении. Если мы узнаем это, мы сможем взять ин­теграл. Итак, наша задача — найти функцию β (*x*)=<*x*|β>. Ее можно найти следующим образом. Мы видели в гл. 14, § 3, как <*р*|β> связано с <*x*|β>. Согласно уравнению (14.24),

C:\Мои документы\gray.jpg

Если нам известно <*р*|β>, то, решив это уравнение, мы найдем <*x*|β>. Но результат, конечно, следовало бы как-то выразить через ψ (*x*)=<*x*|ψ>, потому что считается, что именно эта ве­личина нам известна. Будем теперь исходить из (18.47) и, опять применив (14.24), напишем

C:\Мои документы\gray.jpg

Интеграл берется по *х,* поэтому *р* можно внести под интеграл

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь сравним это с (18.53). Может быть, вы подумали, что <*x*|β> равно *p*ψ(*x*)? Нет, напрасно! Волновая функция <*х*|β>=β(*x*) может зависеть только от *х,* но не от *р*. В этом-то вся трудность.

К счастью, кто-то заметил, что интеграл в (18.55) мо­жно проинтегрировать по частям. Производная e*-ipx/h* по *х* равна *(-i/h)pe-ipx/h,* поэтому интеграл (18.55) это все равно, что

C:\Мои документы\gray.jpg

Если это проинтегрировать по частям, оно превратится в

C:\Мои документы\gray.jpg

Пока речь идет только о связанных состояниях, ψ(*x*) стремится к нулю при *х→*±∞, скобка равна нулю и мы имеем

C:\Мои документы\gray.jpg

*А* вот теперь сравним этот результат с (18.53). Вы видите, что

C:\Мои документы\gray.jpg

Все необходимое, чтобы взять интеграл в (18.52), у нас уже есть. Окончательный ответ таков:

C:\Мои документы\gray.jpg

Мы узнали, как выглядит (18.48) в координатном представлении. Перед нами начинает постепенно вырисовываться интересная картина. Когда мы задали вопрос о средней энергии состояния |ψ>, то ответ был таков:

C:\Мои документы\gray.jpg

То же самое в координатном мире записывается так:

C:\Мои документы\gray.jpg

Здесь  *— алгебраический* оператор, который действует на функцию от *х.*

Когда мы задали вопрос о среднем значении *х,* то тоже обнаружили, что ответ имеет вид

C:\Мои документы\gray.jpg

В координатном мире соответствующие уравнения таковы:

C:\Мои документы\gray.jpg

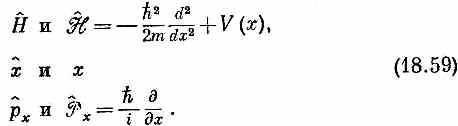
Когда мы задали вопрос о среднем значении *р,* то ответ оказался

C:\Мои документы\gray.jpg

В координатном мире эквивалентные уравнения имели бы вид

C:\Мои документы\gray.jpg

Во всех наших трех примерах мы исходили из состояния |ψ> и создавали новое (гипотетическое) состояние с помощью *квантовомеханического* оператора. В координатном представле­нии мы генерируем соответствующую волновую функцию, дей­ствуя на волновую функцию ψ (*x*) *алгебраическим* оператором. Можно говорить о взаимнооднозначном соответствии (для одно­мерных задач) между



В этом перечне мы ввели новый символ C:\Мои документы\gray.jpgдля алгебраического оператора *(h/i)д/дx:*

C:\Мои документы\gray.jpg

и поставили под  значок *х,* чтобы напомнить, что имеем пока дело с одной только *x*-компонентой импульса.

Результат этот легко обобщается на три измерения. Для других компонент импульса

C:\Мои документы\gray.jpg

При желании можно даже говорить об операторе *вектора* импульса и писать

C:\Мои документы\gray.jpg

где е*х*, е*y* и е*z* — единичные векторы в трех направлениях. Можно записать это и еще изящнее:

C:\Мои документы\gray.jpg

Окончательный вывод наш таков: по крайней мере для некоторых квантовомеханических операторов существуют соот­ветствующие им алгебраические операторы в координатном пред­ставлении. Все, что мы до сих пор вывели (с учетом трехмер­ности мира), подытожено в табл. 18.1. Каждый оператор может быть представлен в двух [равноценных видах](#прим4):

либо

C:\Мои документы\gray.jpg

либо

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь мы дадим несколько иллюстраций применения этих идей. Для начала выявим связь междуC:\Мои документы\gray.jpg.

Если применить C:\Мои документы\gray.jpgдважды, получим

C:\Мои документы\gray.jpg

Это означает, что можно написать равенство

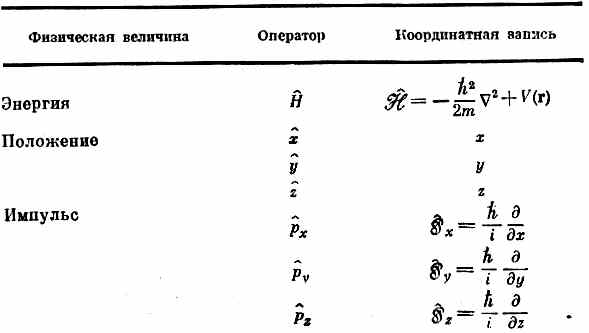
C:\Мои документы\gray.jpg

Или, в векторных обозначениях,

C:\Мои документы\gray.jpg

(Члены в алгебраическом операторе, над которыми нет символа оператора ^, означают простое умножение.) Это уравнение очень приятно, потому что его легко запомнить, если вы еще не забыли курса классической физики. Хорошо известно, что энергия (не­релятивистская) состоит из кинетической энергии *р2/2m* плюс потенциальная, а у нас  *—* тоже оператор полной энергии. Этот результат произвел на некоторых деятелей столь силь­ное впечатление, что они начали стремиться во что бы то ни стало вбить студенту в голову всю классическую физику, прежде чем приступить к квантовой. (Мы думаем иначе!) Параллели очень часто обманчивы. Если у вас есть операторы, то важен порядок различных множителей, а в классическом уравнении он безраз­личен.

*Таблица 18.1* • АЛГЕБРАИЧЕСКИЕ ОПЕРАТОРЫ В КООРДИ­НАТНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ



В гл. 15 мы определили оператор *р^х* через оператор смещения *D^x* [см. формулу (15.27)]:

C:\Мои документы\gray.jpg

где δ — *малое* смещение. Мы должны показать, что это экви­валентно нашему новому определению. В соответствии с тем, что мы только что доказали, это уравнение должно означать то же самое, что и

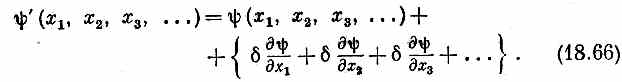
C:\Мои документы\gray.jpg

Но в правой части стоит просто разложение ψ *(x+δ*) в ряд Тэйлора, а ψ (*x*+δ)— то, что получится, если сместить состояние влево на б (или сдвинуть на столько же вправо систему коорди­нат). Оба наши определения *р^* согласуются!

Воспользуемся этим, чтобы доказать еще кое-что. Пусть у нас в какой-то сложной системе имеется множество частиц, которым мы присвоим номера 1, 2, 3, ... . (Для простоты остано­вимся на одномерном случае.) Волновая функция, описывающая состояние, является функцией всех координат *х*1*: х*2, *x*3*,... .* Запишем ее в виде ψ (x1, *х*2*, х*3*,* ...). Сдвинем теперь систему (вле­во) на δ. Новая волновая функция

C:\Мои документы\gray.jpg

может быть записана так:



Согласно уравнению (18.65), оператор импульса состояния |ψ> (назовем его *полным* импульсом) равняется

C:\Мои документы\gray.jpg

Но это все равно, что написать

C:\Мои документы\gray.jpg

Операторы импульса подчиняются тому правилу, что пол­ный импульс есть сумма импульсов отдельных частей. Здесь, как видите, все чудесным образом переплетено и разные вещи взаимно согласуются.

**§ 6. Момент количества движения**

Для интереса рассмотрим еще одну операцию — операцию орбитального момента количества движения. В гл. 15 мы опре­делили оператор *J^z* через *R*^*z*(ϕ) — оператор поворота на угол ϕ вокруг оси z. Рассмотрим сейчас систему, описываемую всего лишь одной-единственной волновой функцией ψ(**r**), которая является функцией одних только координат и не учитывает того факта, что спин у электрона должен быть направлен либо вверх, либо вниз. Это значит, что мы собираемся пока пренебречь *внутренним* моментом количества движения и намерены ду­мать только об *орбитальной* части. Чтобы подчеркнуть разли­чие, обозначим орбитальный оператор *L^z* и определим его че­рез оператор поворота на бесконечно малый угол ε формулой

C:\Мои документы\gray.jpg

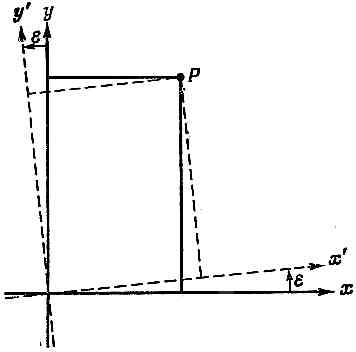
*(напоминаем:* это определение применимо только к состоянию |ψ>, у которого нет внутренних спиновых переменных, а есть только зависимость от координат **r**: *х, у, z).* Если мы взглянем на состояние |ψ> из новой системы координат, повернутой во­круг оси *z* на небольшой угол ε, то увидим новое состояние:

C:\Мои документы\gray.jpg

Если мы решили описывать состояние |ψ> в координатном представлении, т. е. с помощью его волновой функции ψ (**r**), то следует ожидать такого равенства:

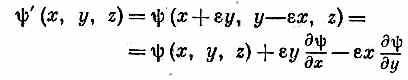
C:\Мои документы\gray.jpg

Что же такоеC:\Мои документы\gray.jpg? А вот что. Точка *Р (х, у)* в *новой* системе коор­динат (на самом деле *х', у',* но мы убрали штрихи) раньше имела координаты *x-*eψ и *y*+ε*x* (фиг. 18.2).



*Фиг. 18.2. Поворот осей во­круг оси z на малый угол ε*.

Поскольку амплитуда того, что электрон окажется в точке *Р*, не меняется от поворота систе­мы координат, то можно писать



(напоминаем, что ε — малый угол). Это означает, что

C:\Мои документы\gray.jpg

Это и есть наш ответ. Обратите, однако, внимание, что это определение эквивалентно такому:

C:\Мои документы\gray.jpg

Или, если вернуться к нашим квантовомеханическим операто­рам, можно написать

C:\Мои документы\gray.jpg

Эту формулу легко запомнить, потому что она похожа на знако­мую формулу классической механики: это z-компонента вектор­ного произведения

**L**=**r**X**p.** (18.72)

Одна из забавных сторон манипуляций с операторами за­ключается в том, что многие классические уравнения переносятся в квантовомеханическую форму. А какие нет? Ведь должны же быть такие, которые не получаются, потому что если бы все пов­торялось, то в квантовой механике не было бы ничего отличного от классической, не было бы новой физики.

Вот вам уравнение, которое отличается. В классической фи­зике

*хрх-рxх=*0*.*

А что в квантовой механике?

C:\Мои документы\gray.jpg

Подсчитаем это в *x*-представлении. Чтобы было видно, что мы делаем, приложим это к некоторой волновой функ­ции ψ(*x*)*.* Пишем

C:\Мои документы\gray.jpg

или

C:\Мои документы\gray.jpg

Вспомним теперь, что производные действуют на всё, что справа. Получаем

C:\Мои документы\gray.jpg

Ответ *не* нуль. Вся операция попросту равнозначна умножению на -*h/i*:

C:\Мои документы\gray.jpg

Если бы постоянная Планка была равна нулю, то квантовые и классические результаты стали бы одинаковыми и не пришлось бы нам учить никакой квантовой механики!

Отметим, что если два каких-то оператора *А* и *В,* взятые в сочетании

C:\Мои документы\gray.jpg

*не дают* нуля, то мы говорим, что «операторы не перестановоч­ны», или «операторы не коммутируют». А уравнение наподо­бие (18.74) называется «перестановочным соотношением». Вы можете сами убедиться, что перестановочное соотношение для *pх* и *у* (или коммутатор *рх* и *у)* имеет вид

C:\Мои документы\gray.jpg

Существует еще одно очень важное перестановочное соотно­шение. Оно относится к моментам количества движения. Вид его таков:

C:\Мои документы\gray.jpg

Если вы хотите приобрести некоторый опыт работы с операто­рами *x*^ и *p*^, попробуйте доказать эту формулу сами.

Интересно заметить, что операторы, которые не коммути­руют, можно встретить и в классической физике. Мы с этим уже сталкивались, когда говорили о поворотах в пространстве. Если вы повернете что-нибудь, например книжку, сперва на 90° вокруг оси *х,* а затем на 90° вокруг оси *у,* то получится совсем не то, что было бы, если бы сначала вы повернули ее на 90° вокруг оси *у,* а после на 90° вокруг оси *х.* Именно это свойство пространства и ответственно за уравнение (18.75).

**§ 7. Изменение средних со временем**

Теперь мы познакомим вас с еще одной интересной вещью: вы узнаете, как средние изменяются во времени. Представим на минуту, что у нас есть оператор *А^,* в который время явным образом не входит. Имеется в виду такой оператор, как *х^* или *р^.*

[А исключаются, скажем, такие вещи, как оператор внешнего потенциала *V*(*x, t*)*,* меняющийся во времени.] Теперь предста­вим, что мы вычислили <*A*>ср в некотором состоянии |ψ>, т. е.

C:\Мои документы\gray.jpg

Как <*A*>ср будет зависеть от времени? Но почему оно вообще может зависеть от времени? Ну, во-первых, может случиться, что оператор сам явно зависит от времени, например, если он был связан с переменным потенциалом типа *V*(*x, t*)*.* Но даже если оператор от *t* не зависит, например оператор *А^=х^,* то соответствующее среднее может зависеть от времени. Ведь среднее положение частицы может перемещаться. Но как может такое движение получиться из (18.76), если *А* от времени не за­висит? Дело в том, что во времени может меняться само состоя­ние |ψ>. Для нестационарных состояний мы часто даже явно отмечали зависимость от времени, записывая их как |ψ(*t*)>. Теперь мы хотим показать, что скорость изменения <*A*>ср

дается новым оператором, который мы обозначимC:\Мои документы\gray.jpg*.* Напомним, что C:\Мои документы\gray.jpg это оператор, так что точка над *А* вовсе не означает диффе­ренцирования по времени, а является просто способом записи

*нового* оператораC:\Мои документы\gray.jpg*,* определяемого равенством

C:\Мои документы\gray.jpg

Задачей нашей будет найти операторC:\Мои документы\gray.jpg*.*

Прежде всего, нам известно, что скорость изменения со­стояния дается гамильтонианом. В частности,

C:\Мои документы\gray.jpg

Это всего-навсего абстрактная форма записи нашего перво­начального определения гамильтониана

C:\Мои документы\gray.jpg

Если мы комплексно сопряжем это уравнение, оно будет эквивалентно

C:\Мои документы\gray.jpg

Посмотрим теперь, что случится, если мы продифференцируем (18.76) по *t.* Поскольку каждое ψ зависит от *t,* мы имеем

C:\Мои документы\gray.jpg

Наконец, заменяя производные **их** выражениями (18.78) и (18.80), получаем

C:\Мои документы\gray.jpg

а это то же самое, что написать

C:\Мои документы\gray.jpg

Сравнивая это уравнение с (18.77), мы видим, что

C:\Мои документы\gray.jpg

Это и есть то интересное соотношение, которое мы обещали; и оно справедливо для любого оператора *А.*

Кстати заметим, что, если бы оператор *А сам* зависел от вре­мени, мы бы получили

C:\Мои документы\gray.jpg

Проверим (18.82) на каком-либо примере, чтобы посмотреть, имеет ли оно вообще смысл. Какой, например, оператор соот­ветствует *х?* Мы утверждаем, что это должно быть

C:\Мои документы\gray.jpg

Что это такое? Один способ установить, что это такое — перейти в координатное представление и воспользоваться алгебраи­ческим оператором C:\Мои документы\gray.jpg

*.* В этом представлении коммутатор равен

C:\Мои документы\gray.jpg

Если вы подействуете всем этим выражением на волновую функцию ψ(*х*)и вычислите везде, где нужно, производные, вы в конце концов получите

C:\Мои документы\gray.jpg

Но это то же самое, что и

C:\Мои документы\gray.jpg

так что мы обнаруживаем, что

C:\Мои документы\gray.jpg

или что

C:\Мои документы\gray.jpg

Прелестный результат. Он означает, что если среднее значе­ние *х* меняется со временем, то перемещение центра тяжести равно среднему импульсу, деленному на массу *т.* Точно как в классической механике.

Другой пример. Какова скорость изменения среднего им­пульса состояния? Правила игры прежние. Оператор этой ско­рости равен

C:\Мои документы\gray.jpg

Опять все можно подсчитать в *x*-представлении. Напомним, что *р^* обращается в *d/dx,* а это означает, что вам придется дифферен­цировать потенциальную энергию *V* (вC:\Мои документы\gray.jpg*),* но только во втором слагаемом. В конце концов остается только один член, и вы получаете

C:\Мои документы\gray.jpg

или

C:\Мои документы\gray.jpg

Опять классический результат. Справа стоит сила, так что мы вывели закон Ньютона! Но помните — это законы для *операто­ров,* которые дают *средние* величины. Они не описывают в де­талях, что происходит внутри атома.

Существенное отличие квантовой механики в том, что *р^х^* не равно *х^р^.* Они отличаются на самую малость — на малень­кое число *h.* Но все поразительные сложности интерференции волн и тому подобного проистекают из того небольшого факта, что *х^р^-р^х^* не совсем нуль.

История этой идеи тоже интересна. С разницей в несколько месяцев в 1926 г. Гейзенберг и Шредингер независимо оты­скали правильные законы, описывающие атомную механику. Шредингер изобрел свою волновую функцию ψ(*х*)и нашел уравнение для нее, а Гейзенберг обнаружил, что природу можно было бы описывать и классическими уравнениями, лишь бы *хр-рх* было равно *h/i,* чего можно было добиться, определив их с по­мощью особого вида матриц. На нашем теперешнем языке он пользовался энергетическим представлением и его матрицами. И то и другое — и матричная алгебра Гейзенберга и дифферен­циальное уравнение Шредингера — объясняли атом водорода. Несколькими месяцами позднее Шредингер смог показать, что обе теории эквивалентны — мы только что это видели. Но две разные математические формы квантовой механики были от­крыты независимо.

***\* Во многих книжках для C:\Мои документы\gray.jpgиспользуется один и тот же символ: физика в них одна и та же, да и удобнее все время обходиться без новых букв. А из контекста всегда ясно, что имеется в виду.***

***\* Уравнение (18.38) не означает, что |α>=x|ψ> [ср. (18.35)]. Сокра­щать на <х| нельзя, потому что множитель х перед <x|ψ> для каждого состояния <х| имеет свое значение. Это — значение координаты электрона в состоянии |х> [см. (18.40)].***

***\* Можно выразить это и иначе. Какую бы функцию (т. е. состояние) вы ни выбрали, ее всегда можно представить в виде линейной комбина­ции базисных состояний, являющихся состояниями с определенной энер­гией. Поскольку в этой комбинации присутствует примесь состояний с более высокими энергиями, то средняя энергия окажется выше энергии основного состояния.***

***\* Элемент объема мы обозначаем dОбъем. Он попросту равен dxdydz, а интеграл берется от -∞ до +∞ по всем трем координатам.***

***Главa 19***

**УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА**

**В КЛАССИЧЕСКОМ КОНТЕКСТЕ.**

**СЕМИНАР ПО СВЕРХПРОВОДИМОСТИ**

[**§ 1. Уравнение** **Шредингера в** **магнитном поле**](#a1)

[**§ 2. Уравне****н****ие непрерывности для вероятностей**](#a2)

[**§ 3. Два ро****да им****пульсов**](#a3)

[**§ 4. Смысл** **в****олновой функции**](#a4)

[**§ 5. Сверхпро****водимость**](#a5)

[**§ 6. Явл****ение М****ейсснера**](#a6)

[**& 7. Квантова****н****ие потока**](#a7)

[**§ 8. Динамика** **с****вер****хпроводимости**](#a8)

[**§ 9. Переходы Дж****оз****ефсона**](#a9)

**§ 1. Уравнение Шредингера** **в магнитном поле**

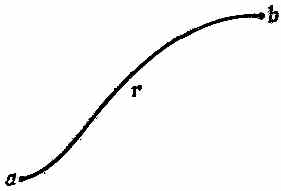
Эту лекцию я читаю вам для развлечения. Захотелось посмотреть, что получится, если начать читать в немного ином стиле. В курс она не входит, и не думайте, что это попытка обучить вас в последний час чему-то новому. Я скорее воображаю, будто провожу семинар или будто делаю отчет об исследованиях перед более подготовленной аудиторией, перед людь­ми, которые в квантовой механике уже многое понимают. Основное различие между семинаром и регулярной лекцией в том, что на семинаре докладчик не приводит все стадии, всю алгебру выкладок. Он просто говорит: «Если вы проделаете то-то и то-то, то получится вот что», а в детали не входит. Вот и в этой лекции будут только высказываться идеи и приводиться *результаты* расчетов. А вы должны понимать, что вовсе не обязательно во всем немедленно и до конца разбираться, надо только верить, что если проделать все выкладки, то все так и полу­чится.

Но это не все. Главное — что об этом мне *хочется* говорить. Это такая свежая, актуальная, современная тема, что вполне законно вы­нести ее на семинар. Тема эта — классический аспект уравнения Шредингера, явление сверх­проводимости.

Обычно та волновая функция, которая появ­ляется в уравнении Шредингера, относится только к одной или к двум частицам. И сама волновая функция классическим смыслом не обладает в отличие от электрического поля, или векторного потенциала, или других подобных вещей. Правда, волновая функция отдельной частицы — это «поле» в том смысле, что она есть функция положения, но классического значения она, вообще говоря, не имеет. Тем не менее бывают иногда обстоятельства, в которых квантовомеханическая волновая функция действи­тельно имеет классическое значение, именно их я и хочу кос­нуться. Своеобразие квантовомеханического поведения веще­ства в мелких масштабах обычно не дает себя чувствовать в круп­номасштабных явлениях, если не считать стандартных выводов о том, что оно вызывает к жизни законы Ньютона, законы так называемой классической механики. Но существуют порой об­стоятельства, в которых особенности квантовой механики могут особым образом сказаться в крупномасштабных явлениях.

При низких температурах, когда энергия системы очень-очень сильно убывает, вместо прежнего громадного количества состояний в игру включается только очень-очень малое количе­ство состояний — тех, которые расположены неподалеку от основного. При таких условиях квантовомеханический характер этого основного состояния может проявиться на макроскопиче­ском уровне. Вот целью этой лекции и будет продемонстрировать связь между квантовой механикой и крупномасштабными эф­фектами — не обычное обсуждение пути, по которому кванто­вая механика в среднем воспроизводится ньютоновой механи­кой, а специальный случай, когда квантовая механика вызывает свои собственные, характерные для нее эффекты в крупных, «макроскопических» размерах.

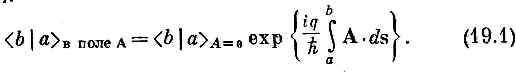
Начну с того, что напомню вам кое-какие свойства уравне­ния [Шредингера](#прим1). Я хочу с помощью уравнения Шредингера описать поведение частицы в магнитном поле, потому что явле­ния сверхпроводимости связаны с магнитными полями. Внеш­нее магнитное поле описывается векторным потенциалом, и вопрос состоит в том, каковы законы квантовой механики в поле векторного потенциала. Принцип, определяющий квантовомеханическое поведение частицы в поле векторного потенциала, очень прост.



*Фиг. 19.1. Амплитуда перехода из а в b по пути r пропорциональна*

C:\Мои документы\gray.jpg

Амплитуда того, что частица при наличии поля пе­рейдет по некоторому пути из одного места в другое (фиг. 19.1), равна амплитуде того, что она прошла бы по этому пути без поля, умноженной на экспоненту от криволинейного интеграла от век­торного потенциала, умноженного в свою очередь на элект­рический заряд и деленного на постоянную Планка [см. гл. 15, § 2 (вып. 6)]:



Это исходное утверждение квантовой механики.

И вот в отсутствие векторного потенциала уравнение Шре­дингера для заряженной частицы (нерелятивистской, без спина) имеет вид

C:\Мои документы\gray.jpg

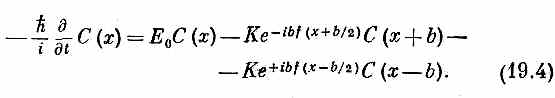
где ϕ — электрический потенциал, так что *q*ϕ — [потен­циальная энергия](#прим3). А уравнение (19.1) равнозначно утвержде­нию, что в магнитном поле градиенты в гамильтониане нужно

каждый раз заменять на градиент минус (*iq/h*)**А**, так что (19.2) пре­вращается в

C:\Мои документы\gray.jpg

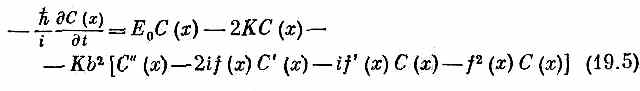
Это и есть уравнение Шредингера для частицы с зарядом *q* (нерелятивистской, без спина), движущейся в электромагнитном поле А, ϕ.

Чтобы стало ясно, что оно правильно, я хочу проиллюстриро­вать это простым примером, когда вместо непрерывного случая имеется линия атомов, расставленных на оси *x* на расстоянии *b* друг от друга, и существует амплитуда —*К* того, что электрон перепрыгнет в отсутствие поля от одного атома [к другому](#прим2). Тогда, согласно уравнению (19.1), если имеется вектор-потен­циал *Аx(х, t)* в *x*-направлении, то амплитуда перескока по сравнению с тем, что было раньше, изменится, ее придется домножить на exp[(*iq/h)Axb*] *—* экспоненту с показателем, равным произведению *iq/h* на векторный потенциал, проинтегрирован­ный от одного атома до другого. Для простоты мы будем писать (*q/h*) *Ax≡f(x),* поскольку *Ах,* вообще говоря, зависит от *х.* Если обозначить через *С(х)≡Сn* амплитуду того, что электрон обнаружится возле атома *n,* расположенного в точке *х,* то скорость изменения этой амплитуды будет даваться уравнением



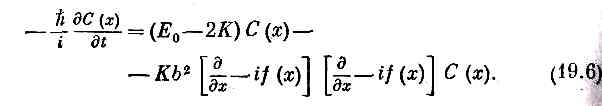
В нем три части. Во-первых, у электрона, который находится в точке *х,* есть некоторая энергия *Е*0*.* Это, как обычно, дает член *Е*0*С*(*х*)*.* Затем имеется член — *КС(х+b),* т. е. амплитуда того, что электрон от атома *n*+1, расположенного в *х+b,* отпрыг­нул на шаг назад. Однако если это происходит в присутствии век­торного потенциала, то фаза амплитуды обязана сместиться со­гласно правилу (19.1). Если *Ах* на расстоянии между соседними атомами заметно не изменяется, то интеграл можно записать по­просту в виде значения *Ах* посредине, умноженного на расстоя­ние. Итак, произведение *(iq/h)* на интеграл равно *ibf(x+b/2).* А раз электрон прыгал назад, я этот сдвиг фазы отмечаю знаком минус. Это дает вторую часть. И точно так же имеется некоторая амплитуда того, что будет прыжок вперед, но на этот раз уже бе­рется векторный потенциал с другой стороны от *х,* на расстоя­нии *b/2,* и умножается на расстояние *b.* Это дает третью часть. В сумме получается уравнение для амплитуды того, что частица в поле, характеризуемом векторным потенциалом, окажется в точке *х.*

Но дальше мы знаем, что если функция *С*(*х*)достаточно плав­ная (мы берем длинноволновый предел) и если мы сдвинем ато­мы потеснее, то уравнение (14.4) (стр. 80) будет приблизитель­но описывать поведение электрона в пустоте. Поэтому следую­щим шагом явится разложение обеих сторон (19.4) по степеням *b,* считая *b* очень малым. К примеру, если *b=*0*,* то правая часть будет равна просто *(Е*0*-*2*К)С(х),* так что в нулевом приближе­нии энергия равняется *Е*0*-*2*К.* Затем пойдут степени *b,* но из-за того, что знаки показателей экспонент противоположны, оста­нутся только четные степени. В итоге, если вы разложите в ряд Тэйлора *С(х), f(x)* и экспоненты и соберете затем члены с *b*2, вы получите



(штрихи обозначают дифференцирование по *х).*

Это ужасное нагромождение разных букв выглядит очень сложно. Но математически оно в точности совпадает с



Вторая скобка, действуя на *С*(*х*)*,* даст *С'*(*х*)минус *if(x)C*(*x*)*.* Первая скобка, действуя на эти два члена, даст член с *С",* члены с первыми производными *f*(*x*) и с первой производной *С*(*х*)*. А* теперь вспомните, что решения в нулевом магнитном поле (см. гл. 11, §3) изображают частицу с эффективной массой *m*эфф, даваемой формулой

*Kb2*=*h/m*эфф

Если вы затем положите *Е*0*=+*2*К* и снова вернетесь к *f*(*x*)*=*(*q/h*)*Ax,* то легко убедитесь, что (19.6) это то же самое, что первая часть (19.3). (Происхождение члена с потенциальной энергией хорошо известно, и я не буду им заниматься.) Утверж­дение (19.1) о том, что векторный потенциал умножает все амп­литуды на экспоненциальный множитель, равнозначно правилу, что оператор импульса (*h/i*)∇заменяется на (h*/i*)∇-*q*A, как мы и сделали в уравнении Шредингера (19.3).

**§ 2. Уравнение непрерывности для вероятностей**

Перехожу теперь ко второму пункту. Важную сторону урав­нения Шредингера отдельной частицы составляет идея о том, что вероятность обнаружить частицу в каком-то месте опреде­ляется квадратом абсолютной величины волновой функции. Для квантовой механики характерно также то, что вероятность сохраняется локально (т. е. в каждом отдельном месте). Когда вероятность обнаружить электрон в таком-то месте убывает, а вероятность обнаружить его в каком-то другом месте возрас­тает (так что полная вероятность не меняется), то что-то в про­межутке между этими местами должно было произойти. Иными словами, электрон обладает непрерывностью в том смысле, что если вероятность спадает в одном месте и возрастает в другом, то между этими местами должно что-то протекать. Так, если вы между ними поставите стенку, то это скажется на вероятностях и они станут не такими, как были. Следовательно, одно только сохранение вероятности не есть полная формулировка закона сохранения, все равно как одно только сохранение энергии не обладает такой глубиной и не представляет такой важности, как локальное сохранение энергии [см. гл. 27, § 1 (вып. 6)]. Если энергия исчезает, то этому должен соответствовать отток энергии от этого места. Вот и у вероятности хотелось бы обнару­жить такой же «ток». Хотелось бы, чтобы было так: если где-нибудь переменится плотность вероятности (вероятность об­наружить что-то там такое в единице объема), то чтобы можно было считать, что вероятность откуда-то сюда притекла (или утекла отсюда куда-то еще). Такой ток был бы вектором, кото­рый можно было бы толковать следующим образом: его *x-ком*понента была бы чистой вероятностью (в секунду и на единицу объема) того, что частица пройдет в направлении *х* через пло­скость, параллельную плоскости *yz.* Проход в направлении +*x* считается положительным потоком, а проход в обратную сто­рону — отрицательным потоком.

Существует ли такой ток? Вы знаете, что плотность вероят­ности P(r, *t)* выражается через волновую функцию

C:\Мои документы\gray.jpg

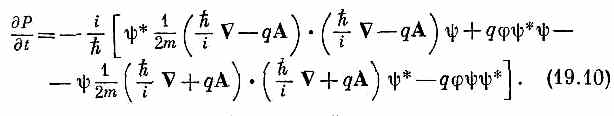
И вот, я спрашиваю: существует ли такой ток J, что

C:\Мои документы\gray.jpg

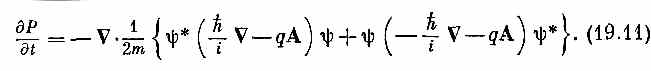
Если я продифференцирую (19.7) по времени, то получу два слагаемых

C:\Мои документы\gray.jpg

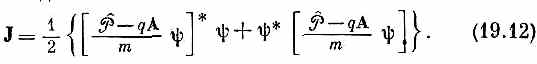
Теперь для *д*ψ*/дt* возьмите уравнение Шредингера — уравне­ние (19.3); кроме того, комплексно его сопрягите, т. е. перемените знак при каждом *i,* чтобы получить *д*ψ*j/дt.* У вас выйдет



Члены с потенциальной энергией и многие другие члены взаимно уничтожатся. А то, что останется, оказывается, дей­ствительно можно записать в виде полной дивергенции. Все уравнение целиком эквивалентно уравнению



Не так уж сложно, как кажется на первый взгляд. Это симмет­ричная комбинация из ψ\*, умноженного на некоторую операцию над ψ, плюс ψ, умноженное на комплексно сопряженную опера­цию над ψ\*. Это просто некоторая величина плюс комплексно сопряженная ей величина, так что все вместе (как и поло­жено быть) вещественно. Операция запоминается так: это попросту оператор импульса минус *qA..* Ток из (19.8) я могу записать в виде



Тогда это и есть тот ток **J**, который удовлетворяет уравнению (19.8).

Уравнение (19.8) показывает, что вероятность сохраняется локально. Если частица исчезает из одной области, то она не может оказаться в другой без того, чтобы что-то не протекло в промежутке между областями. Вообразите, что первая область окружена замкнутой поверхностью, которая проведена так да­леко, что имеется нулевая вероятность обнаружить на ней элект­рон. Полная вероятность обнаружить электрон где-то внутри поверхности равна объемному интегралу от *Р.* Но, согласно теореме Гаусса, объемный интеграл от дивергенции **J** равняется поверхностному интегралу от J. Если ψ на поверхности равно нулю, то (19.12) утверждает, что и **J** есть нуль; значит, полная вероятность отыскать частицу внутри поверхности не может измениться. Только тогда, когда часть вероятности достигает границы, какая-то ее часть может вытечь наружу. Мы вправе говорить, что она выбирается наружу только через поверхность— это и есть локальная сохраняемость.

**§ 3. Два рода импульсов**

Уравнение для тока довольно интересно, хотя порой причи­няет немало забот. Ток можно было бы считать чем-то вроде про­изведения плотности частиц на скорость. Плотность выглядела бы как ψψ\*, так что здесь все в порядке. Каждый член в (19.12) напоминает типичное выражение для среднего значения опера­тора

C:\Мои документы\gray.jpg

Поэтому, быть может, следовало бы рассматривать его как ско­рость потока? Но тогда получается, что скорость с импульсом можно связать двояким образом, ведь с равным правом можно было бы считать, что скоростью должно быть отношение импуль­са к массеC:\Мои документы\gray.jpg*.* Эти две возможности разнятся на вектор-потен­циал.

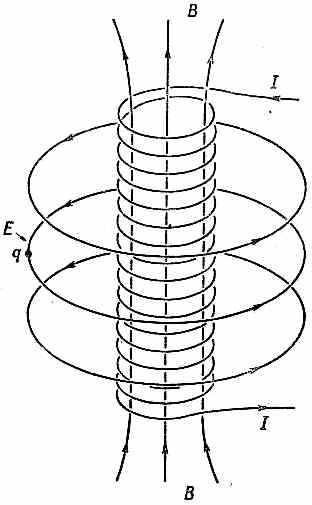
Оказывается, те же две возможности имелись еще в класси­ческой физике, и в ней тоже было найдено, что импульс можно определить [двумя путями](#прим4). Один можно назвать «кинематиче­ским импульсом», но для абсолютной ясности я в этой лекции буду его называть «*mv*-импульсом». Это импульс, получаемый от перемножения массы на скорость. Другой, *более* математичный, более отвлеченный импульс, именуемый иногда «динамическим импульсом», а я его буду называть «*р*-импульс». Итак, у нас есть две возможности:

*mv-импульс=m***v***,* (19.14)

*р-импульс=т***v**+**А***.* (19,15)

И вот оказывается, что в квантовой механике, вклю­чающей магнитные поля, с оператором градиента C:\Мои документы\gray.jpg свя­зан именно *р*-импульс, так что оператор скорости это (19.13).

Здесь я хотел бы немного отклониться от темы и по­яснить, почему так получается—отчего в квантовой механике должно быть нечто по­хожее на (19.15). Волновая функция меняется со временем, следуя уравнению Шредингера (19.3). Если бы я внезапно изменил векторный потенциал, то в первое мгновение вол­новая функция не изменилась бы, а изменилась бы только скорость ее изменения. Теперь представьте себе, что случится в следующих обстоятельствах. Пусть имеется длинный соленоид, в котором я создаю поток магнитного поля (поля В), как пока­зано на фиг. 19.2.



*Фиг. 19.2. Электрическое поле снаружи соленоида, ток в кото­ром увеличивается.*

А поблизости сидит заряженная частица. До­пустим, что этот поток почти мгновенно с нуля вырастает до какого-то значения. Сперва векторный потенциал равен нулю, а потом я его включаю. Это означает, что я внезапно создаю кру­говой вектор-потенциал А. Вы помните, что криволинейный ин­теграл от А вдоль петли это то же самое, что поток поля В сквозь петлю [см. гл. 14, § 1 (вып. 5)]. И что же происходит, когда я мгновенно включаю векторный потенциал? Согласно квантовомеханическому уравнению, внезапное изменение А не вызывает внезапного изменения ψ; волновая функция пока та же самая. Значит, и градиент не изменился.

Но вспомните, что происходит электрически, когда я вне­запно включаю поток. В течение краткого времени, пока поток растет, возникает электрическое поле, контурный интеграл от которого равен скорости изменения потока во времени

**Е**=-*д****A****/дt.* (19.16)

Если поток резко меняется, то электрическое поле достигает огромной величины и оказывает сильное воздействие на частицу. Эта сила равна произведению заряда на электрическое поле; стало быть, в момент появления потока частица получает полный импульс (т. е. изменение в *m***v***),* равный -*q***А**. Иными словами, если вы подействуете на заряд векторным потенциалом, включив его внезапно, то этот заряд немедленно схватит *mv-импульс,* равный -*q***А**. Но имеется нечто, не меняющееся не­медленно,— это разность между *m***v**и -*q***А**.Стало быть, сумма **p***=m***v**+*q***A**и есть то, что не меняется, если вы подвергаете вектор-потенциал внезапному изменению. Именно эту величину мы именуем *p*-импульсом, именно она играет важную роль в классической динамике; она же оказывается существенной и в квантовой механике. Эта величина зависит от характера волновой функции и является преемником оператора

C:\Мои документы\gray.jpg

при наличии магнитного поля.

**§ 4. Смысл волновой функции**

Когда Шредингер впервые открыл свое уравнение, он открыл заодно, что закон сохранения (19.8) есть следствие этого урав­нения. Но он неправильно решил, что *Р* это плотность элект­рического заряда электрона, a **J** — плотность электрического тока, т. е. он думал, что электроны взаимодействуют с элект­ромагнитным полем через эти заряды и токи. Решая свои урав­нения для атома водорода и вычисляя ψ, он не вычислял ника­кой амплитуды (в то время еще не было амплитуд), а толковал это совершенно иначе. Атомное ядро было стационарно, вокруг же него текли токи; заряды *Р* и токи **J** генерировали электро­магнитные поля, и все вместе это излучало свет. Но вскоре, ре­шая задачу за задачей, он понял, что рассуждает не вполне правильно. И именно в этот момент Борн выдвинул весьма не­тривиальную идею. Именно Борн правильно (насколько нам известно) отождествил ψ в уравнении Шредингера с амплиту­дой вероятности, предположив, что квадрат амплитуды — это не плотность заряда, а всего лишь вероятность (на единицу объе­ма) обнаружить там электрон и что если вы находите элек­трон в некотором месте, то там окажется и весь его заряд. Вся эта идея принадлежит Борну.

Волновая функция ψ(**r**) электрона в атоме не описывает, стало быть, размазанного электрона с плавно меняющейся плотностью заряда. Электрон может быть либо здесь, либо там, либо где-то еще, но где бы он ни был, он всегда—точечный заряд. Но, с другой стороны, представим себе случай, когда огромное число частиц находится в одном и том же состоянии, очень боль­шое их число с одной и той же волновой функцией. Что тогда? Одна из них будет здесь, другая — там, и вероятность обнару­жить любую из них в данном месте пропорциональна ψψ\*. Но поскольку частиц так много, то, если я посмотрю в какой-ни­будь объем *dxdydz,* я, вообще говоря, обнаружу там примерно ψψ*\*dxdydz* частиц. Итак, когда ψ— волновая функция каж­дой из огромного количества частиц, поголовно пребывающих в одном и том же состоянии, то в этом случае ψψ\* *можно* отождест­влять с плотностью частиц. Если в этих условиях все частицы несут одинаковые заряды *q,* то мы можем пойти дальше и отож­дествить ψ\*ψ с плотностью *электричества.* Обычно, если ψψ\* имеет размерность плотности вероятности, то ψψ\* надо умножить на *q,* чтобы получить размерность плотности заряда. Для на­ших теперешних целей мы можем включить этот постоянный множитель в ψ и принять за плотность электрического заряда само ψψ\*. Если помнить об этом, то **J^** (тот ток вероятности, ко­торый я вычислил) можно будет считать просто плотностью электрического тока.

Итак, когда в одном и том же состоянии может находиться очень много частиц, возможно иное физическое толкование волновых функций. Плотность заряда и электрический ток мо­гут быть вычислены прямо из волновых функций, и волновые функции приобретают физический смысл, который распростра­няется на классические, макроскопические ситуации.

Нечто подобное может случиться и с нейтральными частица­ми. Если у нас имеется волновая функция отдельного фотона, то это — амплитуда того, что он будет обнаружен где-то. Хотя мы и не писали его, однако существует уравнение для фотонной вол­новой функции, аналогичное уравнению Шредингера для элек­трона. Фотонное уравнение попросту совпадает с уравнениями Максвелла для электромагнитного поля, а волновая функция — с векторным потенциалом А. Волновая функция оказывается обычным векторным потенциалом. Физика квантов света совпа­даете классической физикой, потому что фотоны суть невзаимо­действующие бозе-частицы и многие из них могут пребывать в одинаковом состоянии; более того, как вы знаете, они любят бы­вать в одинаковом состоянии. В момент, когда мириады их ока­жутся в одном и том же состоянии (т. е. в одной и той же электро­магнитной волне), вы сможете непосредственно измерить волно­вую функцию (т. е. векторный потенциал). Конечно, исторически все шло иным путем. Первые наблюдения были проведены при таких обстоятельствах, когда было много фотонов в одинако­вом состоянии, и тем самым удалось открыть правильные урав­нения для отдельного фотона, наблюдая непосредственно своими глазами природу волновой функции на макроскопическом уровне.

Трудность с электроном состоит в том, что вы не можете по­местить в одно и то же состояние больше одного электрона. Поэтому очень долго считалось, что волновая функция уравне­ния Шредингера никогда не будет иметь макроскопического представления, подобного макроскопическому представлению амплитуды для фотонов. Но теперь стало ясно, что явление сверх­проводимости представляет именно такой случай.

**§ 5. Сверхпроводимость**

Вы знаете, что очень многие металлы ниже определенной температуры (температура у каждого металла своя) становятся [сверхпроводящими](#прим5). Если вы как следует снизите температуру то металлы начинают проводить электричество без всякого соп­ротивления. Это явление наблюдалось у очень многих металлов, но не у всех, и теория этого явления причинила немало хлопот. Понадобилось довольно долгое время, чтобы разобраться, что происходит внутри сверхпроводников, и я опишу здесь только то, что будет нужно для наших нынешних целей. Оказывается, что из-за взаимодействия электронов с колебаниями атомов в решетке возникает слабое эффективное *притяжение* между электронами. Грубо говоря, электроны в итоге взаимодействия образуют связанные пары.

Известно также, что каждый отдельный электрон яв­ляется ферми-частицей. Но связанная пара уже будет вести себя как бозе-частица, потому что, если я переставляю местами два электрона в паре, я дважды меняю знак волновой функции, а это означает, что я ничего не меняю. Пара является бозе-частицей.

Энергия спаривания (энергия притяжения электронов) очень-очень слаба. Незначительной температуры достаточно, чтобы тепловое возбуждение разбросало электроны и обратило их в «нормальные» электроны. Но если снизить температуру доста­точно сильно, то эти электроны сделают все от них завися­щее, чтобы прийти в самое наинизшее состояние, и уж тогда-то действительно разберутся попарно.

Мне не хотелось бы, чтобы вы вообразили, будто пары и впрямь скреплены очень тесно, словно точечные частицы. В действительности, именно в этом пункте лежала наибольшая труд­ность в понимании этого явления на первых порах. Два элек­трона, образующие пару, в действительности расходятся на заметные расстояния; и среднее расстояние между парами мень­ше размера отдельной пары. Несколько пар одновременно за­нимают один и тот же объем. Объяснение причины образования электронами в металле пар и оценка энергии, выделяемой при образовании пар, стало триумфом современной науки. Этот фун­даментальный факт в явлении сверхпроводимости впервые разъяснен в теории, созданной Бардином, Купером и [Шриффером](#прим6). Но не это будет темой нашего семинара. Мы попросту примем как данное представление о том, что электроны так или иначе действуют попарно, что можно считать, что эти пары ведут себя более или менее как частицы и что поэтому можно гово­рить о волновой функции «пары».

Уравнение Шредингера для пары более или менее похоже на (19.3). Единственная разница состоит в том, что заряд *q* бу­дет удвоенным зарядом электрона. Кроме того, мы не знаем инер­ции (или эффективной массы) пары в кристаллической решетке, поэтому неизвестно, какое число поставить вместо *т.* Не сле­дует также считать, что если перейти к очень высоким частотам (или коротким волнам), то форма уравнения останется правиль­ной, ведь кинетическая энергия, которая отвечает очень резко меняющимся волновым функциям, может стать столь большой, что разрушит пары. При конечных температурах в соответствии с теорией Больцмана всегда встречается сколько-то разрушенных пар. Вероятность того, что пара разрушится, пропорциональна ехр(-*Eпары/kT).* He связанные попарно электроны называются «нормальными» и движутся по кристаллу обычным образом. Я буду, однако, рассматривать только случай истинно нулевой температуры или, во всяком случае, пренебрегу усложнениями, вызываемыми теми электронами, у которых нет пары.

Раз пары электронов—это бозоны, то когда множество их собирается в одном состоянии, амплитуда перехода других пар в то же состояние становится особенно велика. Значит, почти все пары должны скопиться при наинизшей энергии *в точности* в *одинаковом состоянии,* сбежать кому-либо из них в другое состояние очень нелегко. У каждой пары амплитуда того, что она перейдет в занятое состояние в √*n* раз больше, чем в не­занятое (где хорошо известный фактор √*n* определяется насе­ленностью *n* наинизшего состояния). Значит, мы вправе ожи­дать, что все пары будут двигаться в одном состоянии.

Как же тогда будет выглядеть наша теория? Я обозначу че­рез ψ волновую функцию пары в наинизшем энергетическом со­стоянии. Однако из-за того, что ψψ\* окажется пропорциональ­ным плотности заряда ρ, я с равным правом могу записать ψ как квадратный корень из плотности заряда, умноженный на некоторый фазовый множитель

C:\Мои документы\gray.jpg

где ρ и θ — действительные функции от **r.** (В таком виде можно, конечно, записать любую комплексную функцию.) Что мы под­разумеваем, говоря о плотности заряда,— это ясно, но каков физический смысл фазы 9 волновой функции? Ну что же, да­вайте поглядим, что получится, если мы подставим ψ (r) в (19.12) и выразим плотность тока через эти новые переменные ρ и θ. Это простая замена переменных, и, не повторяя всех выкладок, я приведу результат:

C:\Мои документы\gray.jpg

Поскольку и плотность тока и плотность заряда имеют для сверхпроводящего электронного газа прямой физический смысл, то и ρ и θ — вполне реальные вещи. Фаза столь же наблюдаема, как и ρ: это часть плотности тока **J.** *Абсолютная* фаза ненаблю­даема, но если градиент фазы известен во всех точках, то фаза известна с точностью до константы. И если вы определите по своему желанию фазу в одной точке, то во всех остальных точ­ках она уже определится сама собой.

Кстати заметим, что уравнение для тока можно проанализи­ровать и изящнее, если представить себе, что плотность тока *и впрямь* совпадает с произведением плотности заряда на ско­рость тока электронной жидкости, т. е. что **J**=ρ**v**. Тогда (19.18) равнозначно уравнению

C:\Мои документы\gray.jpg

Мы замечаем, что в *mv*-импульсе есть две части: одна связана с векторным потенциалом, а другая с поведением волновой функции. Иными словами, величина *h*∇θ— это как раз то, что мы называли *р*-импульсом.

**§ 6. Явление Мейсснера**

Теперь уже можно кое-что рассказать и о явлении сверхпро­водимости. Прежде всего здесь отсутствует электрическое сопротивление. А нет сопротивления оттого, что все электроны коллективно пребывают в одинаковом состоянии. При обычном течении тока то один электрон, то другой выбивается из равно­мерного потока, постепенно разрушая полный импульс. Здесь же не так-то просто помешать одному электрону делать то, что делают другие, ибо все бозе-частицы стремятся попасть в оди­наковое состояние. Ток, если уж он пошел, то это навеки.

Легко также понять, что если имеется кусок металла в сверхпроводящем состоянии и вы включите не очень сильное магнит­ное поле (что будет, когда оно сильное, мы обойдем молчанием), то оно не сможет проникнуть в металл. Если бы в момент созда­ния магнитного поля хоть какая-то его часть возросла внутри металла, то в нем появилась бы скорость изменения потока, а в результате и электрическое поле, которое в свою очередь немедленно вызвало бы электрический ток, который, по закону Ленца, был бы направлен на уменьшение потока. А раз все электроны будут двигаться совместно, то бесконечно малое элек­трическое поле уже вызовет достаточный ток, чтобы полностью воспротивиться наложению любого магнитного поля. Значит, если вы включите поле после того как охладили металл до сверхпроводящего состояния, внутрь оно допущено ни за что не будет.

Еще интереснее другое связанное с этим явление, экспери­ментально обнаруженное [Мейсснером](#прим7). Если имеется кусок металла при высокой температуре (т. е. обычный проводник) и в нем вы создали магнитное поле, а затем снизили температуру ниже критического уровня (когда металл становится сверх­проводником), то *поле будет вытолкнуто.* Иными словами, в сверхпроводнике возникает свой собственный ток, и как раз в таком количестве, чтобы вытолкнуть поле наружу.

Причину этого можно понять из уравнений, и сейчас я объяс­ню как. Пусть у нас имеется сплошной кусок сверхпроводящего материала (без отверстий). Тогда в любом установившемся положении дивергенция тока должна быть равна нулю, потому что ему некуда течь. Удобно будет выбрать дивергенцию А рав­ной нулю. (Конечно, полагалось бы объяснить, отчего принятие этого соглашения не означает потери общности, но я не хочу тратить на это время.) Если взять дивергенцию от уравнения (19.18), то в итоге окажется, что лапласиан от θ должен быть ра­вен нулю. Но погодите, а как же с вариацией ρ? Я забыл упо­мянуть об одном важном пункте. В металле существует фон по­ложительных зарядов (из-за наличия атомных ионов решетки). Если плотность заряда ρ однородна, то не будет ни остаточного заряда, ни электрического поля. Если бы в каком-то месте электроны и скопились, то их заряд не был бы нейтрализован и возникло бы сильнейшее отталкивание, которое растолкало бы электроны по всему [металлу](#прим9). Значит, в обычных обстоятель­ствах плотность электронного заряда в сверхпроводниках поч­ти идеально однородна, и я вправе считать ρ постоянным. Да­лее, единственная возможность, чтобы ∇2θ было равно нулю всюду внутри сплошного куска металла,— это постоянство θ. А это означает, что в **J** не входит член с *р*-импульсом. Согласно выражению (19.18), ток пропорционален ρ, умноженному на **А**. Значит в куске сверхпроводящего материала ток с необходимо­стью будет пропорционален вектор-потенциалу

C:\Мои документы\gray.jpg

Знаки ρ и *q* одинаковы (отрицательны), и поскольку ρ — вели­чина постоянная, то я могу положить ρ*q*/*m* =-(некоторая по­стоянная). Тогда

**J**=-(некоторая постоянная)**А**. (19.21)

Это уравнение впервые предложили братья [Лондон](#прим8), чтобы объяснить экспериментальные наблюдения над сверхпроводи­мостью, задолго до того, как люди уяснили себе квантовомеханическое происхождение эффекта.

Мы теперь можем подставить (19.20) в уравнения электро­магнетизма и определить поля. Векторный потенциал связан с плотностью тока уравнением

C:\Мои документы\gray.jpg

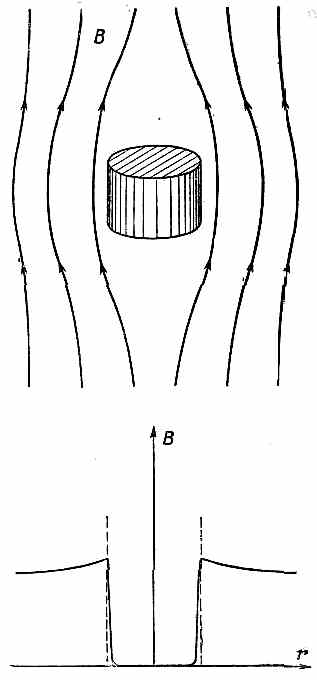
Если вместо **J** я подставлю (19.21), то получу

C:\Мои документы\gray.jpg

где λ2—просто новая постоянная

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь можно попробовать решить это уравнение относи­тельно **А** и детальнее посмотреть, что там происходит. Напри­мер, в одномерном случае у (19.23) имеются экспоненциальные решения вида *е-λx* и *е*+*λх*. Эти решения означают, что вектор­ный потенциал обязан экспоненциально *убывать* по мере удале­ния от поверхности внутрь образца. (Возрастать он не может — будет взрыв.) Если кусок металла очень велик по сравнению с 1/λ, то поле проникнет внутрь только в тонкий слой у поверх­ности толщиной около 1/λ. Все остальное место внут­ри проводника будет сво­бодно от поля, как пока­зано на фиг. 19.3.



*Фиг. 19.3. Сверхпроводящий цилиндр в магнитном поле (а) и магнитное поле* В *как функ­ция от r (б).*

Этим и объясняется явление Мейсснера.

Какова *же* эта «глубина проникновения» 1/λ? Вы помните, что *r*0— «электро­магнитный радиус» элек­трона (2,8•10-13*см*)—вы­ражается формулой

C:\Мои документы\gray.jpg

Вы помните также, что *q* вдвое больше заряда электрона, так что

C:\Мои документы\gray.jpg

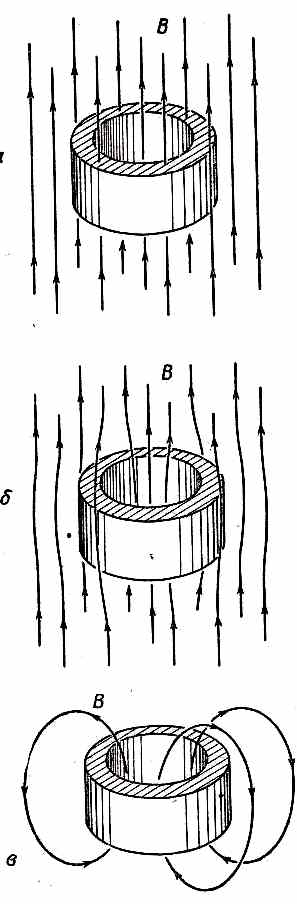
Записав ρ в виде *qeN,* где *N —* число электронов в кубическом сантиметре, мы получим

C:\Мои документы\gray.jpg

У такого металла, как свинец, на каждый кубический сантиметр приходится 3•1022 атомов, и если каждый атом снабдит нас одним электроном проводимости, то 1/λ будет порядка 2•10-5 *см .* Это дает вам порядок величины эффекта.

**§ 7. Квантование потока**

Уравнение Лондонов (19.21) было предложено, чтобы объяс­нить наблюдавшиеся при сверхпроводимости явления, включая эффект Мейсснера. Однако в последнее время прозвучали и бо­лее поразительные предсказания. Одно из предсказаний Лон­донов было таким своеобразным, что никто даже не обратил на него особого внимания. Об этом я и расскажу. На сей раз *возь­мем* сверхпроводящее кольцо, толщина которого по сравнению с 1/λ велика, и посмотрим, что случится, если мы сперва на­ложим на кольцо магнитное поле, затем охладим кольцо до сверхпроводящего состояния, а потом уберем первоначальный источник поля В. Последовательность этих событий изображена на фиг. 19.4.



*Фиг. 19,4. Кольцо в магнитном поле.*

*а — в нормальном, состоянии; б — в сверхпроводящем состоянии; в — после того, как внешнее поле убрали.*

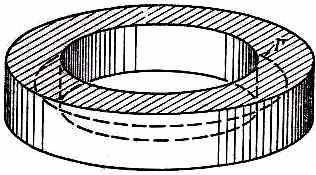
В нормальном состоянии (фиг. 19.4,*а*) в теле коль­ца имеется магнитное поле. Когда кольцо становится сверхпроводящим, поле (как мы уже знаем) *выталкивается* из вещества кольца. Но тогда, как показано на фиг. 19.4,*б*, останется неко­торый поток поля сквозь отверстие кольца. Если теперь убрать внешнее поле, то те линии поля, которые шли через отверстие, будут «заморожены» (фиг. 19.4,*в*). Поток Ф через центр сойти на нет не может, потому что *дФ/дt* должно быть все время равно контурному интегралу от **Е** вдоль кольца, а **Е** внутри сверхпроводника равно нулю. И вот, когда мы убираем внешнее поле, то по кольцу начинает течь сверхпроводящий ток, цель которого — сохранить поток через кольцо неизменным. (Это старая идея о вихревых токах, только с нулевым сопротивле­нием.) Но все эти токи будут течь только у самой поверхности (на глубине не более 1/λ), что следует из такого же анализа, как и проделанный для сплошного куска. Эти токи в состоянии сде­лать так, чтобы магнитное поле не попадало внутрь кольца, но зато все время держалось вокруг него.

Но здесь имеется существенное различие, и наши уравнения предсказывают поразительный эффект. Рассуждение о том, что фаза θ в сплошном куске должна быть постоянной, *к кольцу неприменимо;* в этом вам помогут убедиться следующие рас­суждения.

Далеко в глубине тела кольца плотность тока **J** равна нулю; значит, (19.18) означает, что

C:\Мои документы\gray.jpg

Теперь посмотрим, что получится, если мы возьмем контурный интеграл от А по кривой Г, которая проходит по самому центру поперечного сечения кольца, нигде не подходя близко к по­верхности (фиг. 19.5).



*Фиг. 19.5. Кривая* Г *внутри сверхпроводникового кольца.*

Из (19.26)

C:\Мои документы\gray.jpg

Вы знаете, что контурный интеграл от **А** по любой петле равен потоку В через

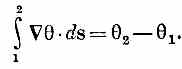
петлю

C:\Мои документы\gray.jpg

Стало быть, уравнение (19.27) превращается в

C:\Мои документы\gray.jpg

Криволинейный интеграл от одной точки до другой (ска­жем, от точки 1 до точки 2) от градиента равен разности значений функции в этих двух точках:



Если начать сближать точки 1 и 2, чтобы петля стала замкнутой, то на первый взгляд могло бы показаться, что θ1 станет равно θ2, так что интеграл в (19.28) обра­тится в нуль. Так оно и было бы для замкнутых петель в односвязном куске сверхпроводника, но для кольцеобразного куска это не обязательно. Единствен­ное физическое требование, которое мы вправе предъявить, это чтобы *в каждой точке волновал функция могла принимать толь­ко одно значение.* Что бы ни делала фаза θ, когда вы движетесь по кольцу, но когда вы возвращаетесь к начальной точке, фаза θ обязана обеспечить вам прежнее значение волновой функцииC:\Мои документы\gray.jpg. Так будет, если θ меняется на 2π*n*, где *n —* любое целое число. Итак, если мы делаем один полный оборот вокруг кольца, то левая часть (19.27) должна быть равна *h*•2π*n.* Подставляя сюда (19.28), получаем

C:\Мои документы\gray.jpg

*Захваченный поток всегда обязан быть кратным числу 2πh/q*! Если бы кольцо было классическим объектом с идеальной (т. е. бесконечной) проводимостью, то можно было бы подумать, что в кольце обязан остаться весь проходивший через него поток, какой бы величины он ни был, т. е. можно заморозить любое количество потока. Но квантовомеханическая теория сверхпроводимости утверждает, что поток может быть либо ну­лем, либо 2*πh/q,* либо 4π*h/q*, либо 6π*h/q* и т. д., но только не про­межуточным числом! Он обязан быть кратным фундаментальной квантовомеханической константе.

[Лондон](#прим12) предсказывал, что поток, захватываемый сверхпроводящим кольцом, окажется квантованным и допустимая величина потока будет дана уравнением (19.29), где *q=qe*— заряду электрона. Согласно Лондону, фундаментальная единица потока должна быть равна 2π*h/q*е, т. е. около 4•10-7*гс*•*см2.* Чтобы представить себе эту величину, вообразите тонкий цилиндрик толщиной в одну десятую долю миллиметра; магнит­ное поле внутри него, если он содержит такую величину потока, составит около одного процента магнитного поля Земли. С по­мощью чувствительных магнитных измерений такой поток можно зарегистрировать.

В 1961 г. Дивер и [Фейрбэнк](#прим11) из Станфордского универси­тета предприняли поиски такого квантованного потока и нашли его; примерно в то же время это проделали Долл и [Набауэр](#прим10) в Германии.

В опыте Дивера и Фейрбэнка сверхпроводящий цилиндрик был изготовлен электроосаждением тонкого слоя олова на ку­сочке медной проволоки диаметром 1,3•10-3 *см* (длиной 1 *см).* Ниже 3,8° К олово становится сверхпроводящим, а медь остает­ся нормальным металлом. Проволока была помещена в неболь­шое регулируемое магнитное поле и температура снижалась до тех пор, пока олово не стало сверхпроводником. Затем убрали внешний источник поля. Вы понимаете, что по закону Ленца это вызвало появление тока, стремившегося погасить эффект убывания потока внутри цилиндра. Цилиндрик приобрел маг­нитный момент, пропорциональный потоку внутри него. Этот магнитный момент измеряли, для чего водили проволочкой вверх и вниз (как иглой в швейной машинке, но со скоростью 100 раз в секунду) внутри пары маленьких катушечек, поме­щенных у концов оловянного цилиндрика. Мерой магнитного момента было наводимое в катушках напряжение.

Дивер и Фейрбэнк, проделав свой опыт, обнаружили, что поток действительно квантуется, но *фундаментальная единица равна половине той, которую предсказал Лондон.* Тот же резуль­тат получили Долл и Набауэр. Сперва это выглядело очень [таинственно](#прим13), но теперь стало ясно, отчего так вышло. Соглас­но теории сверхпроводимости Бардина, Купера и Шриффера, то *q*, которое стоит в (19.29), это заряд *пары* электронов, т. е. равно 2*qe.* Фундаментальная единица потока равна

C:\Мои документы\gray.jpg

т. е. равна половине того, что было предсказано Лондоном. Теперь все сходится, и измерения свидетельствуют о существо­вании предсказанного чисто квантовомеханического, но круп­номасштабного явления.

**§ 8. Динамика сверхпроводимости**

Эффект Мейсснера и квантование потока подтверждают наши общие представления. Для полноты стоит еще продемонстри­ровать, как с этой точки зрения выглядели бы полные уравне­ния сверхпроводящей жидкости,— получается довольно инте­ресно. До сих пор я подставлял выражение для ψтолько в урав­нения плотности заряда и тока. Но если я их подставлю в полное уравнение Шредингера, то получу уравнения для ρ и θ. Интересно поглядеть, что из этого выйдет, потому что перед нами сейчас «жидкость» электронных пар с плотностью заряда ρ и с таинственной θ; мы можем посмотреть, как выглядят уравнения такой «жидкости»! Итак, подставим волновую функ­цию (19.17) в уравнение Шредингера (19.3) и вспомним, что ρ и θ это вещественнее функции от *х, у* и *z*. Если мы отделим вещественную часть от мнимой, то уравнений станет два. Чтобы запись была короче, я, следуя уравнению (19.19), напишу

C:\Мои документы\gray.jpg

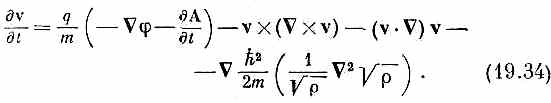
Тогда одно из двух уравнений примет вид

C:\Мои документы\gray.jpg

Поскольку ρv это и есть **J** [см. (19.18)], то мы просто еще раз получили уравнение непрерывности. Второе же уравнение говорит об изменении θ:

C:\Мои документы\gray.jpg

Те из вас, кто хорошо знаком с гидродинамикой (думаю, очень немногие), в этом уравнении узнают уравнение движения электрически заряженной жидкости, если только отождествить *h*θ с «потенциалом скоростей»; но только в последнем члене, который должен быть энергией сжатия жидкости, имеется до­вольно странная зависимость от плотности р. Во всяком случае, это уравнение утверждает, что скорость изменения величины *h*θдается членом с кинетической энергией *(т/2)v2* плюс член с потенциальной энергий *q*ϕ плюс добавочный член с множите­лем *h*2, который мы назовем «квантовомеханической энергией». Мы видели, что внутри сверхпроводника электростатические силы поддерживают ρ очень однородным, поэтому во всех прак­тических применениях этим членом почти наверняка можно пре­небречь при условии, что имеется только одна сверхпроводящая область. Если между двумя сверхпроводниками имеется гра­ница (или есть другие обстоятельства, за счет которых ρ может начать резко меняться), то этот член может стать существенным. Для тех, кто не так уж знаком с уравнениями гидродинамики, я попробую переписать (19.33) в том виде, который позволит яснее видеть физику. Я использую (19.31), чтобы θ выразить через v. Беря от всего уравнения (19.33) градиент и выражая с помощью (19.31) ∇θ через **А** и **v**, я получу



Что же означает это уравнение? Вспомним, во-первых, что

C:\Мои документы\gray.jpg

Затем заметим, что если взять ротор от уравнения (19.19), то получится

C:\Мои документы\gray.jpg

поскольку ротор градиента всегда нуль. Но ∇X**A** — это маг­нитное поле В, так что два первых члена можно записать в виде

*q/m*(**E**+**v**X**B**).

Наконец, вы должны уяснить себе, что *дv/дt* обозначает ско­рость изменения скорости жидкости в *данной точке.* Если же вас интересует отдельная *частица,* то ее ускорение выразится *полной* производной от v (или, как иногда говорят в динамике жидкостей, «сопутствующим ускорением»), связанной с *д***v***/дt* формулой [см. гл. 40, § 2 (вып. 7)]

C:\Мои документы\gray.jpg

В правой части (19.34) стоит тот же член (**v**•∇)**v**. Если перенести его влево, то (19.34) перепишется так:

C:\Мои документы\gray.jpg

Затем из (19.36) следует

C:\Мои документы\gray.jpg

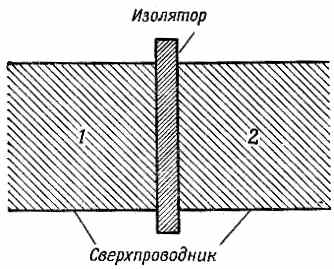
Это и есть уравнения движения сверхпроводящей электрон­ной жидкости. Первое уравнение — это просто закон Ньютона для заряженной жидкости в электромагнитном поле. Оно ут­верждает, что ускорение каждой частицы жидкости с зарядом *q* вызывается действием обычной лоренцевой силы *q*(**E**+**v**X**B**) плюс добавочная сила, являющаяся градиентом какого-то таин­ственного квантовомеханического потенциала; эта сила обычно мала и становится заметной только при соприкосновении двух разных сверхпроводников. Второе уравнение утверждает, что жидкость «идеальна» — ротор обладает нулевой дивергенцией (у В дивергенция всегда нуль). Это означает, что скорость может быть выражена через потенциал скоростей. Обычно для идеаль­ной жидкости пишут ∇X**v** =0, но *для идеальной заряженной жид­кости в магнитном поле* это уравнение обращается в (19.39).

Итак, уравнение Шредингера для электронных пар в сверх­проводнике дает нам уравнения движения электрически заря­женной идеальной жидкости. Теория сверхпроводимости сов­падает с задачей гидродинамики заряженной жидкости. Если вы хотите решить какую-либо задачу, касающуюся сверхпровод­ников, вы берете эти уравнения для жидкости [или равноценную им пару (19.32) и (19.33)] и сочетаете их с уравнениями Мак­свелла, чтобы получить поля. (Заряды и токи, которыми вы пользуетесь, чтобы узнать поля, должны, естественно, включать как заряды и токи от сверхпроводника, так заряды и токи от внешних источников.)

Кстати, я считаю, что уравнение (19.38) не очень-то правиль­но, в него следует добавить член с плотностью. Он определяется не квантовой механикой, а вытекает из обычной энергии, связан­ной с вариациями плотности, так же как в уравнении для обыч­ной жидкости должна стоять плотность потенциальной энергии, пропорциональная квадрату отклонения ρ от ρ0 (невозмущенной плотности, которая в нашем случае равна также плотности за­ряда кристаллической решетки). Поскольку должны наблюдать­ся силы, пропорциональные градиенту этой энергии, то в (19.38) обязан стоять еще один член, пропорциональный ∇(ρ-ρ0)2. В нашем анализе он не появился, потому что возникает он от взаимодействия между частицами, которым я, применяя прибли­жение независимых частиц, пренебрег. Но это та самая сила, па которую я сослался, когда делал качественное утверждение о том, что электростатические силы стремятся сохранить ρ вдоль сверхпроводника почти неизменным.

**§ 9. Переходы Джозефсона**

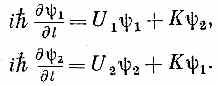
И вот напоследок я перехожу к разбору очень интересного случая, впервые отмеченного [Джозефсоном](#прим14), к анализу того, что бывает при контакте двух сверхпроводников. Пусть у нас есть два сверхпроводника, связанные тонким слоем изолятора (фиг. 19.6).



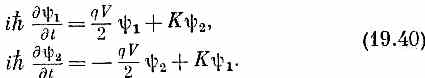
*Фиг. 19.6. Два сверхпроводника, разделенных тонким изолятором.*

Теперь такое устройство называется «переходом Джозефсона». Если изолирующий слой толст, электроны не могут пройти через него, но если он достаточно тонок, то элект­роны могут иметь заметную квантовомеханическую амплитуду перескока. Это попросту новый пример квантовомеханического проникновения через барьер. Джозефсон проанализировал та­кой случай и выяснил, что при этом должно происходить немало странных явлений.

Для анализа такого контакта я обозначу амплитуду того, что электрон окажется на одной стороне, через ψ1, а того, что на другой,— через ψ2. В сверхпроводящем состоянии волновая функция ψ1 — это общая волновая функция всех электронов с одной стороны, а ψ2 — соответствующая функция с другой стороны. Эту задачу можно решать для сверхпроводников раз­ного сорта, но мы ограничимся самым простым случаем, когда вещество по обе стороны одно и то же, — так что соединение са­мое простое и симметричное. И пусть пока никакого магнитного поля нет. Тогда связь между этими двумя амплитудами должна быть такой:



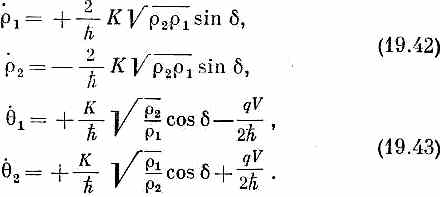
Постоянная *К* характеризует данный переход. Если бы *К* была равна нулю, то эта пара уравнений попросту описывала бы наинизшее энергетическое состояние (с энергией *U)* каж­дого сверхпроводника. Но обе стороны связаны амплитудой *К,* выражающей возможность утечки из одной стороны в другую (это как раз известная нам по двухуровневым системам ампли­туда «переброса»). Если обе стороны одинаковы, то *U*1 будет равно *U*2, и я имею право их просто вычесть. Но теперь пред­положим, что мы подсоединили две сверхпроводящие области к двум полюсам батарейки, так что к переходу оказалась при­ложенной разность потенциалов *V.* Тогда U1*-U*2*=qV.* Для удобства я могу выбрать нуль энергии посредине между *U*1 и *U*2, и тогда уравнения обратятся в



Это стандартные уравнения двух связанных квантовомеханических состояний. На этот раз давайте проанализируем их по-иному. Сделаем подстановки:

C:\Мои документы\gray.jpg

где θ1 и θ2— фазы по обе стороны контакта, a ρ1и ρ2— плотно­сти электронов в этих двух точках. Вспомним, что на практике ρ1 и ρ2 почти точно совпадают друг с другом и равны ρ0 — нормальной плотности электронов в сверхпроводящем материале. Если вы теперь подставите эти формулы для ψ1 и ψ2 в (19.40) и приравняете вещественные части вещественным, а мни­мые — мнимым, то получится четверка уравнений (для крат­кости обозначено θ2-θ1=δ):



Первая пара уравнений говорит, что ρ1=-ρ2 «Но,— ска­жете вы,— они ведь обе должны быть равны нулю, раз ρ1и ρ2 обе постоянны и равны ρ0». Не совсем. Эти уравнения описывают не все. Они говорят, какими были бы ρ1 и ρ2, *если бы не было до­бавочных электрических сил* за счет того, что нет баланса между электронной жидкостью и фоном положительных ионов. Они сообщают, как начали бы меняться плотности, и поэтому описывают тот ток, который начал бы течь. Этот ток, текущий от стороны 1 к стороне 2, был бы как раз равен ρ1(или -ρ2), или

C:\Мои документы\gray.jpg

Такой ток вскоре зарядил бы сторону 2, *если можно было бы за­быть,* что обе стороны соединены проводами с батареей. Однако он не зарядит область 2 (и не разрядит область 1), потому что возникнут токи, которые выровняют потенциал. В наши урав­нения эти токи от батареи не входят. Если бы их добавить, то ρ1 и ρ2 оставались бы фактически постоянными, а ток через переход определялся бы формулой (19.44).

Поскольку ρ1 и ρ2 действительно остаются постоянными и равными ρ0, давайте положим *2K*ρ*0/h=J0* и напишем

*J*=*J*0sinδ. (19.45)

Тогда *J*0, подобно *К,* есть число, характеризующее данный переход.

Другая пара уравнений (19.43) дает нам θ1и θ2. Нас инте­ресует разность δ=θ2-θ1, которую мы хотим подставить в (19.45); из уравнений же мы имеем

C:\Мои документы\gray.jpg

Это значит, что можно написать

C:\Мои документы\gray.jpg

где δ0 — значение δ при *t=*0*.* He забывайте также, что *q —* это заряд пары, *q=*2*qe.* В уравнениях (19.45) и (19.47) содер­жится важный результат — общая теория переходов Джозефсона.

Так что же из них следует? Сначала приложим постоянное напряжение. Если приложить постоянное напряжение V0, то аргумент синуса примет вид δ*0+(q/h)V*0*t.* Поскольку *h/q—*чис­ло маленькое (по сравнению с обычными напряжениями и вре­менами), то синус будет колебаться довольно быстро и в итоге никакой ток не пойдет. (Практически, поскольку температура не равна нулю, небольшой ток все же будет из-за проводимости «нормальных» электронов.) С другой стороны, если напряже­ние на переходе равно *нулю,* то ток может пойти! Если нет на­пряжения, то ток может равняться любой величине между +*J*0 и -*J*0 (в зависимости от того, каково значение δ0). Но попробуй­те приложить напряжение — и ток обратится в нуль. Это стран­ное поведение недавно наблюдалось [экспериментально](#прим16).

Ток можно получить и другим способом: кроме постоянного напряжения — приложить еще и высокую частоту. Пусть

C:\Мои документы\gray.jpg

где *v<<V.* Тогда

C:\Мои документы\gray.jpg

Но при малых Δ*x*

C:\Мои документы\gray.jpg

Разложив по этому правилу sinδ, я получу

C:\Мои документы\gray.jpg

Первый член в среднем дает нуль, но второй в нуль не об­ращается, если

C:\Мои документы\gray.jpg

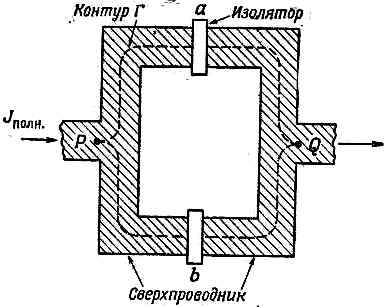
Значит, если частота переменного напряжения равна *(q/h)V*0*,* то через контакт пойдет ток. [Шапиро](#прим15) сообщил, что он наб­людал такой резонансный эффект.

Если вы просмотрите работы на эту тему, то заметите, что в них формула для тока часто записывается в виде

C:\Мои документы\gray.jpg

где интеграл берется по пути, ведущему через переход. Причина здесь в том, что если переход находится в поле векторного по­тенциала, то фаза амплитуды переброса видоизменяется так, как было объяснено вначале [уравнение (19.1)]. Если вы всюду включите такой сдвиг фазы, то получите нужные формулы.

Наконец, я хотел бы описать очень эффектный и интерес­ный опыт по интерференции токов, проходящих через два пере­хода, который был недавно проделан. Мы привыкли встречаться в квантовой механике с интерференцией амплитуд от двух ще­лей. Сейчас мы будем иметь дело с интерференцией двух токов, текущих через два перехода между сверхпроводниками. Она вызывается различием в фазах, с которыми сливаются токи, прошедшие по двум разным путям. На фиг. 19.7 показано па­раллельное соединение двух переходов *а* и *b* между сверхпровод­никами.



*Фиг. 19.7. Два па­раллельных перехода Джозефсона.*

Концы сверхпроводников *Р* и *Q* подключены к прибо­рам, которыми мы измеряем ток. Внешний ток *J*полн будет суммой токов через каждый из переходов. Пусть *Ja* и *Jb* это то­ки через переходы, и пусть их фазы будут δ*а* и δ*b*. Разность фаз волновых функций в точках *Р* и *Q* должна быть одинаковой, по какому бы пути вы ни пошли. На том пути, который следует через переход *а,* разность фаз между *Р* и *Q* равна δ*а* плюс кри­волинейный интеграл от векторного потенциала вдоль верхнего пути:

C:\Мои документы\gray.jpg

Почему? Потому что фаза θ связана с **А** уравнением (19.26). Если вы это уравнение проинтегрируете вдоль какого-то пути, то левая часть даст изменение фазы, которое тем самым как раз окажется пропорциональным криволинейному интегралу от **А**, что и написано. Изменение фазы по нижнему пути может быть записано подобным же образом:



Эти величины должны быть равны; если я их вычту, то получу, что разность дельт должна быть равна контурному интегралу от **А** по замкнутому пути

C:\Мои документы\gray.jpg

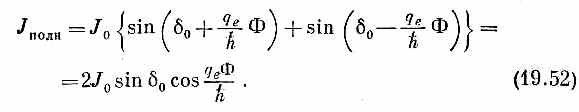
Здесь интеграл берется по замкнутому контуру Г (см. фиг. 19.7), проходящему через оба перехода. Интеграл от А это магнитный поток Ф через контур. Итак, две дельты оказываются отличаю­щимися на 2*qe/h,* умноженное на магнитный поток Ф, который проходит между двумя ветвями схемы:

C:\Мои документы\gray.jpg

Изменяя магнитное поле в схеме, я смогу контролировать эту разность фаз. Я ее прилажу так, чтобы посмотреть, проявится ли в полном токе, текущем сквозь оба перехода, интерференция между его частями. Полный ток равен сумме *Ja* и *Jb.* Для удоб­ства я приму

C:\Мои документы\gray.jpg

Тогда



Мы не знаем, каково значение δ0, и природа здесь может, в зависимости от обстоятельств, вытворять все, что ей заблаго­рассудится. В частности, δ0 может зависеть от прилагаемого к переходам внешнего напряжения. Но что бы мы ни делали, sinδ0 не окажется больше единицы. Значит, *предельно сильный* ток для каждого данного Ф дается формулой

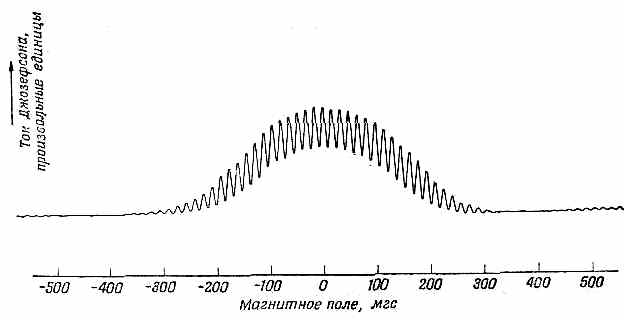
C:\Мои документы\gray.jpg

Этот предельный ток меняется, смотря по тому, каково Ф, и сам достигает максимума всякий раз, когда

C:\Мои документы\gray.jpg

где *n —* целое число. Иными словами, ток достигает своего максимума, когда зацепляющийся за схему поток принимает те самые квантованные значения, которые мы получили в уравнении (19.30)!

Ток Джозефсона через двойной переход недавно [был изме­рен](#прим18) как функция магнитного поля в области между ветвями. Результаты приведены на фиг. 19.8.



Фиг. 19.8. Запись тока через два параллельных перехода Джозефсона как функции магнитного поля в области между двумя переходами.

Здесь мы видим общий фон от токов, вызываемых различными эффектами, которыми мы пренебрегли, но быстрые колебания тока при изменении маг­нитного поля объясняются наличием интерференционного члена *cos(qeФ/h)* в (19.52).

Один из самых интригующих вопросов квантовой механики— это вопрос о том, существует ли векторный потенциал в том месте, где [нет поля](#прим17). Опыт, который я только что описал, был проделан тоже с узеньким соленоидом, помещенным между дву­мя переходами, так что заметное магнитное поле В было только внутри соленоида, а на сверхпроводящие провода его попа­дало пренебрежимо мало. И вот оказалось, что сила тока колеблется с изменением потока магнитного поля внутри этого соленоида, даже если само поле и не касается проводов. Это еще одно доказательство «физической реальности» векторного по­тенциала [см. гл. 15, § 5 (вып. 6)].

Я не знаю, что теперь на очереди. Но посмотрите-ка, что можно было бы сделать. Во-первых, заметьте, что интерференция между двумя переходами может быть применена для создания чувствительного магнитометра. Если площадь, охватываемая двумя переходами, равна, скажем, 1 *мм*2*,* то максимумы на кри­вой фиг. 19.8 будут отстоять друг от друга на 2•10-5 *гс.* Одну десятую промежутка между пиками запросто можно заметить; значит, таким соединением можно будет измерять поля вели­чиной в 2•10-6*гс*, или замерять большие поля со столь же хоро­шей точностью. Можно даже пойти дальше. Представим, на­пример, что мы вплотную друг к другу на равных расстояниях расставили 10—20 переходов. Тогда получится интерференция на 10—20 щелях, и при изменении магнитного поля мы полу­чим очень резкие максимумы и минимумы. Вместо интерфе­ренции на двух щелях у нас будет двадцати-, а может быть, и стощелевой интерферометр для измерения магнитного поля. Вероятно, можно предсказать, что измерения магнитных полей при использовании квантовомеханической интерференции ста­нут почти такими же точными, как измерения длин световых волн.

Это еще одна иллюстрация к тому, что происходит в физике в последнее время — появление транзистора, лазера, а теперь эти переходы сверхпроводников, практическое значение кото­рых пока еще не раскрыто полностью. Квантовая механика, открытая в 1926 г., имела за своими плечами почти 40 лет развития, когда вдруг внезапно она получила множество ре­альных практических применений. Как-то сразу появилась возможность крайне деликатно и тонко управлять природой.

И должен вам сообщить, джентльмены, как это ни прискорб­но, что для того, чтобы принять в этом участие, вам абсо­лютно необходимо как можно быстрее изучить квантовую меха­нику. В этом курсе мы попытались отыскать путь, на котором тайны этой области физики стали бы вам понятными как мож­но раньше.

*КОНЕЦ ТРЕТЬЕГО ТОМА*

***\*Jaklevic, Lambe, Silver, Mercereau, Phys. Rev. Letters, 12, 159 (1964).***

***\*\*Jaklevic, Lambe, Silver, Mercereau, Phys. Rev. Letters, 12, 274 (1964).***

***\* P. W. Andегsоn, J. M. Роwеll, Phys. Rev. Letters, 10, 230 (1963).***

***\*\* S. Shapiго, Phys. Rev. Letters, 11, 80 (1963).***

***\* В. D. Josephson, Physics Letters, 1, 251 (1962).***

\* Когда-то Онзагер говорил, что это возможно (см. цитированную на стр. 243 книжку Лондона), но никто не понимал, почему.

***\* F. London, Superfluids, Vol. 1, New York, 1950, p. 152.***

***\*\* B. S. Deaver, Jr., W. M. Fairbank, Phys. Rev. Letters, 7, 43 (1961).***

***\*\*\* R. Doll, M. Nabauer, Phys. Rev. Letters, 7, 51 (1961),***

***\* В действительности, если бы электрическое поле оказалось чересчур сильным, то пары разорвались бы, и среди возникших «нормаль­ных» электронов началось бы движение за нейтрализацию всяческих излишеств в положительном заряде. Но все же для образования этих нормальных электронов понадобилась бы энергия, так что основная мысль, заключающаяся в том, что почти однородная плотность ρ очень выгодна энергетически, остается справедливой.***

***\*\* Н. London, F. London, Proc. Roy. Soc. (London), A149, 71 (1935); Physica, 2, 341 (1935).***

***\* W. Meissner, R. Oclisenfeld, Naturwiss., 21, 787 (1933).***

***\* I. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, Phys. Rev., 108, 1175 (1957) (см. перевод в сборнике «Теория сверхпроводимости», ИЛ, 1960).***

***\* Впервые это открыл Оннес в 1911 г. [Н. К. Оnnes, Comm. Phys. Lab., Univ. Leyden, № 119, 120, 122 (1911)]. Прекрасное современное изложение предмета вы найдете в книге E. A. Lуntоn, Supercondu­ctivity, New York, 1962 (есть перевод: E. Линтон, Сверхпроводи­мость, М., 1964).***

***\* См., например, J. D. Jackson, Classical Electrodynamics, New York, 1962 (есть перевод: Д. Джексон, Классическая электро­динамика, изд-во «Мир», 1965).***

***\* Только, пожалуйста, не путайте это ϕ с нашим прежним обозначе­нием состояния ϕ !***

\*\* К — это та самая величина, которая в задаче о линейной решетке обозначалась буквой А (см. гл. 11).

***\* Фактически это не напоминание, потому что некоторые из этих уравнений я раньше не приводил; не забудьте, что я веду настоя­щий семинар.***

***Эпилог***

Ну что ж, я выступал перед вами два года, пора и перестать. Кое в чем я хотел бы попросить прощения, кое в чем нет. Я на­деюсь (более того, знаю!), что человек двадцать-тридцать из вас оказались в состоянии следить за всем с большим подъемом и получили большое удовольствие. Но я знаю и то, что «обучение редко приносит плоды кому-либо, кроме тех, кто предрасполо­жен к нему, но им оно почти не нужно». Значит, о тех двух-трех десятках из вас, которые все понимали, я могу сказать, что лишь раскрыл перед ними истинное положение вещей. Что же касается прочих, то было бы жаль, если бы мои лекции заста­вили их возненавидеть предмет. Я никогда прежде не препода­вал элементарной физики и поэтому приношу им всяческие из­винения. Но все же я надеюсь, что не очень вас напугал и вы не бросите этого замечательного занятия. Может быть, кто-нибудь другой выучит вас всему, чему нужно, не вызывая раздраже­ния, и в конце концов вы вдруг поймете, что все это не так страшно, как сперва казалось.

Смею заметить, наконец, что я не ставил себе целью подго­товить вас к каким-то экзаменам и даже к работе в промышлен­ности или в военном деле. Я хотел, чтобы большинство из вас смогло оценить красоту нашего прекрасного мира и вместе с тем получить физическое представление о мире, которое, я думаю, составляет сейчас главную часть истинной культуры нашей эпохи. (Вероятно, найдутся преподаватели других дисци­плин, которые захотят что-то возразить, но я-то знаю, что они абсолютно неправы.)

А может быть, вы не только сумеете отдать должное этой культуре; не исключено, что и вас самих потянет подключиться к этому величайшему дерзанию, на которое когда-либо пус­кался человеческий разум.